

DIE ÄQUIVALENZ DER GIBBSschen ENSEMBLES FÜR QUANTENGITTERSYSTEME

Wolfgang Bayer

1976



Digitized by the Internet Archive
in 2026

DIE ÄQUIVALENZ DER GIBBSSCHEN ENSEMBLES FÜR
QUANTENGITTERSYSTEME

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Fachbereichs Physik
der Ludwig-Maximilians-Universität München

vorgelegt von
Wolfgang Bayer
München, Mai 1976



1. Berichterstatter: Priv.-Doz. Dr. W. Ochs
 2. Berichterstatter: Prof. Dr. H. J. Meister
- Tag der mündlichen Prüfung: 2. August 1976

ZUSAMMENFASSUNG

In dieser Arbeit untersuchen wir die Frage, unter welchen Bedingungen in einem Quantengittersystem die Wahrscheinlichkeitsverteilungen einer beliebigen Observablen bezüglich des mikrokanonischen, des kanonischen und des großkanonischen Ensembles gleich sind ("statistische Äquivalenz der Gibbsschen Ensembles"). Wir lösen dieses Problem für solche Quantengittersysteme, die Zustände besitzen, in denen nicht jeder Gitterpunkt mit einem Teilchen besetzt ist. Für endliche Systeme sind die drei Wahrscheinlichkeitsverteilungen (bis auf spezielle Observablen) trivialerweise voneinander verschieden, so daß wir eine statistische Äquivalenz nur im Grenzfall eines unendlich großen Systems erwarten können. Dazu müssen wir zunächst die Existenz der thermodynamischen Limites der Wahrscheinlichkeitsverteilungen einer beliebigen Observablen bezüglich der drei Gibbsschen Ensembles beweisen. Als zentrales Hilfsmittel unserer Untersuchung erweist sich die sog. verallgemeinerte spezifische mikrokanonische Entropie, aus der wir die asymptotische Wahrscheinlichkeitsverteilung bezüglich des mikrokanonischen Ensembles ableiten können. Die Existenz der thermodynamischen Limites der beiden anderen Wahrscheinlichkeitsverteilungen läßt sich aus der Existenz des thermodynamischen Limes der Wahrscheinlichkeitsverteilung bezüglich des mikrokanonischen Ensembles ableiten. Für alle drei Gibbsschen Ensembles sind die asymptotischen Wahrscheinlichkeitsverteilungen qualitativ gleich und haben folgende Form:

- a) Entweder sind die asymptotischen Verteilungsfunktionen außerhalb jeweils eines bestimmten abgeschlossenen Intervalls I Null bzw. Eins und über die Wahrscheinlichkeitsverteilung

innerhalb dieser Intervalle können wir nichts aussagen, oder
b) die asymptotischen Verteilungsfunktionen sind sogar Heaviside-Funktionen.

Im Fall (b) ist für alle drei Gibbsschen Ensembles der thermodynamische Limes des Erwartungswerts der betrachteten spezifischen Observablen gleich dem Wert, in dem die asymptotische Verteilungsfunktion ihren Sprung hat.

Die Frage der statistischen Äquivalenz der drei Gibbsschen Ensembles können wir nur im Fall (b) vollständig beantworten: Zwischen den Parametern der Gibbsschen Ensembles bestehen Relationen, die statistische Analoga thermodynamischer Relationen darstellen. Sind diese Relationen eineindeutig, dann sind für jede Observable des Systems die asymptotischen Verteilungsfunktionen bezüglich der drei Gibbsschen Ensembles identisch. Im Fall (a) sind die Äquivalenzaussagen komplizierter, da wir über die Wahrscheinlichkeitsverteilungen innerhalb der Intervalle I nichts aussagen können.

Zum Abschluß zeigen wir, daß das Supremum der mittleren Entropie unter der Nebenbedingung bestimmter Erwartungswerte gleich der verallgemeinerten spezifischen mikrokanonischen Entropie ist. Mit diesem Satz dehnen wir das Jaynessche Prinzip der maximalen Entropie zur Charakterisierung von Gleichgewichtszuständen auf unendlich große Systeme aus.

INHALTSVERZEICHNIS

1. Einleitung	7
2. Quantengittersysteme	12
3. Der thermodynamische Limes	27
4. Das mikrokanonische Ensemble	32
4.1 Die Wahrscheinlichkeitsverteilung einer spezifischen Observablen bezüglich des mikrokanonischen Ensembles	32
4.2 Der thermodynamische Limes für eine spezielle Folge von Parallelepipeden	38
4.3 Eigenschaften der verallgemeinerten spezifischen mikrokanonischen Entropie	42
4.4 Der thermodynamische Limes für Folgen, die im Sinne von Lanford unendlich groß werden	61
4.5 Die mikrokanonische Entropie	69
4.6 Die Wahrscheinlichkeitsverteilung im Grenzfall eines unendlich großen Systems	73
5. Das kanonische Ensemble	82
5.1 Die Existenz des thermodynamischen Limes der Wahr- scheinlichkeitsverteilung einer spezifischen Observablen bezüglich des kanonischen Ensembles . .	82
5.2 Die kanonische Helmholtzsche freie Energie . . .	90
5.3 Wahrscheinlichkeitsverteilungen im Grenzfall eines unendlich großen Systems	93
6. Das großkanonische Ensemble	107
6.1 Die Existenz des thermodynamischen Limes der Wahr- scheinlichkeitsverteilung einer spezifischen Observablen bezüglich des großkanonischen Ensembles	107
6.2 Der großkanonische Druck	117

6.3 Wahrscheinlichkeitsverteilungen im Grenzfall eines unendlich großen Systems	120
7. Die thermodynamische Äquivalenz der drei Gibbsschen Ensembles	132
8. Die statistische Äquivalenz der drei Gibbsschen Ensembles	134
8.1 Die statistische Äquivalenz des mikrokanonischen und des kanonischen Ensembles	134
8.2 Die statistische Äquivalenz des mikrokanonischen und des großkanonischen Ensembles	140
8.3 Die statistische Äquivalenz des kanonischen und des großkanonischen Ensembles	145
9. Unendlich große Systeme	151
9.1 Die algebraische Beschreibung unendlich großer Systeme	152
9.2 Das Maximum der mittleren Entropie unter Neben- bedingungen	162
9.3 Translationsinvariante Gleichgewichtszustände unendlich großer Quantengittersysteme	174
Anhang: Konvexe Funktionen	180
Literaturverzeichnis	187

1. EINLEITUNG

In der statistischen Mechanik benützt man zur Beschreibung eines endlichen Systems, das sich im Gleichgewicht befindet, die drei von Gibbs [14] im Rahmen der klassischen statistischen Mechanik eingeführten sog. Gibbsschen Ensembles, nämlich das mikrokanonische, das kanonische und das großkanonische Ensemble. Damit stellt sich die Frage, ob diese drei Beschreibungen in einem noch zu definierenden Sinn äquivalent sind.

Betrachten wir das Problem zunächst vom Standpunkt der Thermodynamik aus. Im traditionellen Ansatz zur Begründung der Thermodynamik durch die statistische Mechanik identifiziert man den Logarithmus der Zustandssummen der Gibbsschen Ensembles mit thermodynamischen Potentialen. Für endliche Systeme besitzen die statistischen Analoga allerdings nur annähernd die gleichen Eigenschaften (Extensivität, Stabilitätsbedingungen,...) wie die entsprechenden thermodynamischen Potentiale. Nur im Grenzfall eines unendlich großen Systems, im sog. thermodynamischen Limes, stimmen die spezifischen, d.h. die durch einen extensiven Parameter dividierten, statistischen Analoga mit den entsprechenden spezifischen thermodynamischen Potentialen überein. Wir interessieren uns hier nur für einen Teilaspekt der mit diesen Identifizierungen verbundenen Probleme, nämlich für die Frage, ob die durch die drei Gibbsschen Ensembles definierten statistischen Analoga thermodynamischer Potentiale durch Legendre-Transformationen ineinander überführbar sind. Ist dies der Fall, dann sind die drei Gibbsschen Ensembles thermodynamisch äquivalent.

Obwohl schon Gibbs [14] dieses Äquivalenzproblem betrachtete, wurden erst in den letzten fünfzehn Jahren befriedigende Ergebnisse

erzielt. Sowohl für klassische Systeme $\backslash [11,12,32,40]$ als auch für quantenmechanische Systeme $[11,16,29,32,41]$ sind die durch die drei Gibbsschen Ensembles definierten spezifischen statistischen Analoga thermodynamischer Potentiale im Grenzfall eines unendlich großen Systems mittels verallgemeinerter Legendre-Transformationen eindeutig ineinander überführbar (siehe Kapitel 7).

Betrachtet man die Frage der Äquivalenz der drei Gibbsschen Ensembles vom allgemeineren Standpunkt der statistischen Mechanik aus, so muß man wenigstens die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der makroskopischen Observablen bezüglich der drei Gibbsschen Ensembles miteinander vergleichen. Eine statistische Äquivalenz, d.h. gleiche Wahrscheinlichkeitsverteilungen der spezifischen makroskopischen Observablen, kann man auch hier nur im Grenzfall eines unendlich großen Systems erwarten. Bevor man also die Frage der statistischen Äquivalenz untersuchen kann, muß man zuerst die Existenz der thermodynamischen Limites der Wahrscheinlichkeitsverteilungen beweisen.

In der vorliegenden Arbeit untersuchen wir dieses statistische Äquivalenzproblem für Quantengittersysteme. Dabei gehen wir nach der gleichen Methode vor, mit der Lanford [27] dieses Problem für klassische Systeme behandelte.

Aus mathematischen Gründen können wir das Lanfordsche Programm nicht für alle Quantengittersysteme durchführen. Zum Beispiel darf bei einem Quantenspinsystem nicht jeder Gitterpunkt mit einem Spin besetzt sein. Diese Einschränkung benötigen wir, um die Existenz des thermodynamischen Limes der sog. verallgemeinerten spezifischen mikrokanonischen Entropie beweisen zu können. Aus der Grenzfunktion leiten wir dann die Wahrscheinlichkeitsverteilung der betrachteten spezifischen Observablen bezüglich des mikrokanonischen Ensembles

im Grenzfall eines unendlich großen Systems ab.

Die Existenz des thermodynamischen Limes der Wahrscheinlichkeitsverteilung einer spezifischen Observablen bezüglich des kanonischen (großkanonischen) Ensembles beweisen wir mit Hilfe der Existenz des thermodynamischen Limes der Wahrscheinlichkeitsverteilung bezüglich des mikrokanonischen (kanonischen) Ensembles. Für alle drei Gibbsschen Ensembles kommen wir hinsichtlich der Wahrscheinlichkeitsverteilung einer spezifischen Observablen im Grenzfall eines unendlich großen Systems zu qualitativ gleichen Ergebnissen:

- a) Entweder konvergieren die entsprechenden Verteilungsfunktionen gegen Heaviside-Funktionen, oder
- b) die asymptotischen Verteilungsfunktionen sind außerhalb jeweils eines bestimmten abgeschlossenen Intervalls identisch gleich Null bzw. Eins. Über die Wahrscheinlichkeitsverteilungen innerhalb dieser Intervalle können wir nichts aussagen.

Im Fall (a) ist für alle drei Gibbsschen Ensembles die Sprungstelle der entsprechenden Verteilungsfunktion durch den thermodynamischen Limes des Erwartungswerts der betrachteten spezifischen Observablen in dem entsprechenden Ensemble gegeben. Zunächst erscheint es etwas unbefriedigend, daß der Fall (b) auftreten kann. Da wir aber die Existenz von Phasenübergängen nicht ausschließen, können wir nicht erwarten, daß in allen Fällen die Verteilungsfunktionen die Gestalt von Heaviside-Funktionen haben.

Die Frage der statistischen Äquivalenz der drei Gibbsschen Ensembles können wir nur im Fall (a) vollständig beantworten. Wir geben an dieser Stelle nur das Ergebnis des Vergleichs des mikrokanonischen Ensembles mit dem kanonischen Ensemble wieder. In die Äquivalenzaussage geht ganz entscheidend eine Relation zwischen

dem Parameter β des kanonischen Ensembles und dem Parameter x des mikrokanonischen Ensembles (also zwischen der Temperatur T und der spezifischen Energie u) ein, nämlich das statistische Analogon der thermodynamischen Relation

$$f = u - T s \quad (1.1)$$

zwischen der spezifischen Helmholtzschen freien Energie f und der spezifischen Entropie s . Ist diese Relation eindeutig (entspricht also einer bestimmten Temperatur genau eine spezifische Energie), dann gilt für jede spezifische Observable des Systems: Die asymptotische Verteilungsfunktion der betrachteten spezifischen Observablen ist sowohl im mikrokanonischen als auch im kanonischen Ensemble eine Heaviside-Funktion mit gleicher Sprungstelle. Analoge Aussagen erhalten wir für die anderen Paare Gibbs-scher Ensembles. Für den Fall (b) sind die Äquivalenzaussagen komplizierter (siehe Kapitel 8).

Zum Abschluß dieser Arbeit gehen wir auf die Theorie der unendlich großen Quantengittersysteme ein. Die physikalische Motivation für die Betrachtung unendlich großer Systeme kommt von der Tatsache, daß sich die Thermodynamik nur im Grenzfall eines unendlich großen Systems aus der statistischen Mechanik exakt ableiten läßt. Mathematisch beschreibt man ein unendlich großes System durch eine quasilokale C^* -Algebra [44]. Dabei kann man auf die bereits vorhandene Theorie der C^* -Algebren zurückgreifen [5,6,46].

Wir beweisen zunächst eine Relation zwischen der verallgemeinerten mikrokanonischen Entropie und der mittleren Entropie eines translationsinvarianten Zustands eines unendlich großen Systems. Damit läßt sich dann zeigen, daß das Prinzip der maximalen

Entropie (Jaynessches Prinzip [21]) auch auf unendlich große Systeme sinnvoll angewandt werden kann.

2. QUANTENGITTERSYSTEME

Das typische Beispiel eines Quantenspinsystems ist das Heisenberg-Modell eines Ferromagneten. Es basiert auf der Vorstellung, daß die Atome mit Spin $\frac{1}{2}$ in einem regelmäßigen Gitter angeordnet sind. Man vernachlässigt Gitterschwingungen und nimmt an, daß die Atome durch ihren Spinzustand vollständig beschrieben werden. Da die Spinoperatoren eines quantenmechanischen Spin- $\frac{1}{2}$ -Systems durch die Paulischen Spinmatrizen σ^i ($i=1,2,3$) gegeben sind, ordnet man jedem Gitterpunkt x einen zweidimensionalen komplexen Hilbertraum $\mathbb{H}_x$ zu. Ein System aus n Atomen beschreibt man durch den Hilbertraum

$$\mathbb{H} = \bigotimes_{k=1}^n \mathbb{H}_{x_k}, \quad (2.1)$$

das Tensorprodukt der Hilberträume $\mathbb{H}_{x_k}$ ($k=1, \dots, n$). Der Hamiltonoperator dieses Systems hat im Heisenberg-Modell die Form

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^n J_{kl} (\sigma_k^1 \sigma_l^1 + \sigma_k^2 \sigma_l^2 + \sigma_k^3 \sigma_l^3) - h \sum_{k=1}^n \sigma_k^3, \quad (2.2)$$

wobei der erste Term die Paarwechselwirkungen und der zweite Term die Wechselwirkungen mit einem äußeren Feld h beschreibt [18].

Mit der mathematischen Struktur des Heisenberg-Modells kann man nicht nur Quantenspinsysteme beschreiben, sondern auch ein Gittergas identischer Bosonen [31]. Dabei interpretiert man

$$N_x = \frac{1}{2}(1 - \sigma_x^3) \quad (2.3)$$

als Besetzungszahloperator des Gitterpunktes x .

Den Begriff des Quantengittersystems erhalten wir durch Verallgemeinerung des Heisenberg-Modells [26,44] .

Wir nehmen an, daß das Gitter als eine additive Gruppe durch v -Tupel ganzer Zahlen parametrisiert werden kann und identifizieren es der Einfachheit halber mit $\mathbb{Z}^v$. Jedem Gitterpunkt $x \in \mathbb{Z}^v$ ordnen wir einen Hilbertraum $\mathbb{H}_x$ mit der endlichen Dimension K zu. Jeder endlichen Teilmenge $\Lambda \subset \mathbb{Z}^v$ wird das Tensorprodukt

$$\mathbb{H}(\Lambda) := \bigotimes_{x \in \Lambda} \mathbb{H}_x \quad (2.4)$$

zugeordnet. Für jedes endliche $\Lambda \subset \mathbb{Z}^v$ bezeichnet $\mathbb{H}(\Lambda)$ die Algebra der linearen Operatoren auf $\mathbb{H}(\Lambda)$.⁺

Seien $\Lambda_1, \Lambda_2 \subset \mathbb{Z}^v$ mit $\Lambda_1 \cap \Lambda_2 = \emptyset$. Dann ist $\mathbb{H}(\Lambda_1 \cup \Lambda_2)$ isomorph zu $\mathbb{H}(\Lambda_1) \otimes \mathbb{H}(\Lambda_2)$. Wir identifizieren nun einen Operator $A_1 \in \mathbb{H}(\Lambda_1)$ mit dem Operator $A_1 \otimes 1_{\Lambda_2} \in \mathbb{H}(\Lambda_1 \cup \Lambda_2)$, wobei 1_{Λ_2} der Identitätsoperator auf $\mathbb{H}(\Lambda_2)$ ist. Ist insbesondere $\Lambda_1 \subset \Lambda$, so identifizieren wir $A_1 \in \mathbb{H}(\Lambda_1)$ mit $A_1 \otimes 1_{\Lambda \setminus \Lambda_1} \in \mathbb{H}(\Lambda)$. In Zukunft werden wir der Einfachheit halber den Identitätsoperator weglassen, da er sich eindeutig aus dem Kontext ergibt.

Für das Gitter $\mathbb{Z}^v$ ist die Translationsgruppe eine Symmetriegruppe. Um die später benötigte Translationsinvarianz ausdrücken zu können, führen wir für jedes $a \in \mathbb{Z}^v$ und jedes $x \in \mathbb{Z}^v$ die unitäre Abbildung

$$V_x(a) : \mathbb{H}_x \rightarrow \mathbb{H}_{x+a} \quad (2.5)$$

ein, wobei $V_x(0)$ gleich dem Identitätsoperator auf $\mathbb{H}_x$ ist und

⁺ Für endliche Teilmengen von $\mathbb{Z}^v$ führen wir das Symbol $\Lambda \subset \mathbb{Z}^v$ ein.

$$V_x(a_1 + a_2) = V_{x+a_2}(a_1) V_x(a_2) \quad (2.6)$$

für alle $a_1, a_2 \in \mathbb{Z}^V$ gilt. Für jedes $\Lambda \subset \subset \mathbb{Z}^V$ definieren wir:

$$V_\Lambda(a) := \bigotimes_{x \in \Lambda} V_x(a) \quad (2.7)$$

Als nächstes führen wir Wechselwirkungen, d.h. Potentiale ein. Der Hamiltonoperator (2.2) des Heisenberg-Modells ist lediglich aus Paar-Wechselwirkungen und Wechselwirkungen mit einem äußeren Feld aufgebaut. Im Prinzip ist eine solche Einschränkung nicht nötig.

Definition 2.1:

Ein Potential eines Quantengittersystems über $\mathbb{Z}^V$ ist eine Abbildung ϕ , die jedem $\Lambda \subset \subset \mathbb{Z}^V$ einen linearen Operator $\phi(\Lambda) \in \mathcal{H}(\Lambda)$ derart zuordnet, daß gilt:

$$(i) \quad \phi(\Lambda) \text{ ist selbstadjungiert.} \quad (2.8)$$

$$(ii) \quad \phi(\emptyset) = 0 \quad (2.9)$$

$$(iii) \quad \phi(\Lambda+a) = V_\Lambda(a) \phi(\Lambda) V_{\Lambda+a}(-a) \quad \text{für alle } a \in \mathbb{Z}^V \quad (2.10)$$

$$(iv) \quad \sum_{\Lambda \ni 0} \frac{\|\phi(\Lambda)\|}{n(\Lambda)} < \infty, \quad (2.11)$$

wobei $n(\Lambda)$ die Anzahl der Gitterpunkte von Λ bezeichnet und $\|\phi(\Lambda)\|$ die Operatornorm von $\phi(\Lambda)$ in $\mathcal{H}(\Lambda)$ ist.

Die Menge aller Potentiale bezeichnen wir mit $\mathcal{B}$.

Die Menge $\mathcal{B}$ der Potentiale ist bezüglich der Norm

$$\|\phi\| := \sum_{X \ni 0} \frac{\|\phi(X)\|}{n(X)} \quad (2.12)$$

ein reeller separabler Banachraum [44].

Den Hamiltonoperator $H(\Lambda)$ des $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ entsprechenden Teilsystems mit der Wechselwirkung $\phi \in \mathbb{B}$ definieren wir dann durch

$$H(\Lambda) := \sum_{X \subset \Lambda} \phi(X) . \quad (2.13)$$

Da ϕ translationsinvariant ist (2.10), ist auch $H(\Lambda)$ translationsinvariant.

Wir sind nun in der Lage, die Bedingung (2.11) zu interpretieren. Ist $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$, so ist

$$H(\Lambda) = \sum_{X \subset \Lambda} \phi(X) = \sum_{x \in \Lambda} \sum_{\substack{X \ni x \\ X \subset \Lambda}} \frac{\phi(X)}{n(X)} . \quad (2.14)$$

Damit ist wegen der Translationsinvarianz von ϕ

$$\|H(\Lambda)\| \leq n(\Lambda) \|\phi\| , \quad (2.15)$$

d.h. $\|\phi\|$ ist eine obere Schranke für den Betrag der Energie pro Gitterpunkt.

Es stellt sich nun die Frage, welche Observablen wir neben dem Hamiltonoperator betrachten wollen. Für jedes $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ ist eine Observable ein selbstadjungierter Operator $T \in \mathcal{B}(\Lambda)$. Wir werden nur solche Operatoren betrachten, die in der Form

$$T = \sum_{X \subset \Lambda} \psi(X) \quad (2.16)$$

mit $\psi \in \mathbb{B}$ geschrieben werden können. Allgemein führen wir die folgende Bezeichnung ein.

Definition 2.2:

Sei $\phi \in \mathcal{B}$ und sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$. Dann definieren wir die mit dem Potential ϕ auf $\mathcal{H}(\Lambda)$ verbundene Observable durch

$$U_{\phi}(\Lambda) := \sum_{X \subset \Lambda} \phi(X) \quad . \quad (2.17)$$

In vielen Fällen ist die Menge $\mathcal{B}$ zu umfangreich, um für sie gewünschte Relationen zeigen zu können. Daher betrachten wir noch folgende Einschränkung.

Definition 2.3:

Ein Potential $\phi \in \mathcal{B}$ heißt ein Potential endlicher Reichweite, wenn die Anzahl der Mengen $X \subset \mathbb{Z}^V$ mit $0 \in X$ und $\phi(X) \neq 0$ endlich ist. Die Menge dieser Potentiale bezeichnen wir mit $\mathcal{B}_0$.

Die Menge $\mathcal{B}_0$ liegt dicht in $\mathcal{B}$, woraus insbesondere die schon erwähnte Separabilität von $\mathcal{B}$ folgt.

Bezeichnen wir mit $\text{diam}(X)$ den maximalen Abstand zweier Punkte der Menge $X \subset \mathbb{Z}^V$, so ist die Reichweite R_{ϕ} des Potentials $\phi \in \mathcal{B}_0$ durch

$$R_{\phi} := \sup \{ \text{diam}(X) : X \subset \mathbb{Z}^V \text{ mit } \phi(X) \neq 0 \} \quad (2.18)$$

gegeben. Aus der Translationsinvarianz von ϕ folgt unmittelbar, daß R_{ϕ} endlich ist. Seien nun $\Lambda_1, \Lambda_2 \subset \mathbb{Z}^V$ derart, daß der Abstand zwischen ihnen größer als R_{ϕ} ist. Dann gilt:

$$U_{\phi}(\Lambda_1 \cup \Lambda_2) = \sum_{X \subset \Lambda_1 \cup \Lambda_2} \phi(X)$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{X \subset \Lambda_1} \phi(X) + \sum_{X \subset \Lambda_2} \phi(X) \\
 &= U_{\phi}(\Lambda_1) + U_{\phi}(\Lambda_2) \quad , \quad (2.19)
 \end{aligned}$$

d.h. die Λ_1 und Λ_2 entsprechenden Teilsysteme mit der Wechselwirkung ϕ stehen miteinander nicht in Wechselwirkung, wenn der Abstand zwischen ihnen größer als die Reichweite R_{ϕ} des Potentials ist. Allgemein gilt

Lemma 2.4 [48]:

Sei $\phi \in \mathbb{B}_0$ und habe $U_{\phi}(\Lambda)$ die Spektraldarstellung

$$U_{\phi}(\Lambda) = \sum_{\lambda^{\Lambda} \in \sigma(U_{\phi}(\Lambda))} \lambda^{\Lambda} P(\lambda^{\Lambda}) \quad , \quad (2.20)$$

wobei $\sigma(\cdot)$ das Spektrum eines linearen Operators bezeichnet.

Seien $\Lambda_i \subset \mathbb{Z}^V$ ($i=1, \dots, k$) derart, daß der Abstand zwischen Λ_i und Λ_j für $i \neq j$ größer als R_{ϕ} ist. Sei

$$\Lambda = \bigcup_{i=1}^k \Lambda_i \quad . \quad (2.21)$$

Dann gilt:

$$a) \quad U_{\phi}(\Lambda) = \sum_{i=1}^k U_{\phi}(\Lambda_i) \quad . \quad (2.22)$$

$$b) \quad \sigma(U_{\phi}(\Lambda)) = \left\{ \lambda : \lambda = \sum_{i=1}^k \lambda^{\Lambda_i} \quad , \quad \lambda^{\Lambda_i} \in \sigma(U_{\phi}(\Lambda_i)) \right\} \quad . \quad (2.23)$$

c) Ist $\lambda^{\Lambda} \in \sigma(U_{\phi}(\Lambda))$, dann gilt für den entsprechenden Projektionsoperator:

$$P(\lambda^{\Lambda}) = \sum \left\{ \bigotimes_{i=1}^k P(\lambda^{\Lambda_i}) : \lambda^{\Lambda_i} \in \sigma(U_{\phi}(\Lambda_i)) \text{ mit } \lambda^{\Lambda} = \sum_{i=1}^k \lambda^{\Lambda_i} \right\} \quad . \quad (2.24)$$

Für unsere Problemstellung benötigen wir eine weitere Einschränkung der Potentiale.

Definition 2.5:

Sei $\phi \in \mathbb{B}_0$. Existiert in jedem Hilbertraum $\mathbb{H}_x$, $x \in \mathbb{Z}^v$ ein Vektor κ_x^ϕ mit $\|\kappa_x^\phi\| = 1$ derart, daß für alle $\Lambda \subset \subset \mathbb{Z}^v$, alle $a \in \mathbb{Z}^v$ und alle $\psi_{\Lambda \setminus \{a\}} \in \mathbb{H}(\Lambda \setminus \{a\})$

$$\phi(\Lambda) \kappa_a^\phi \otimes \psi_{\Lambda \setminus \{a\}} = 0 \quad (2.25)$$

ist, dann heißt ϕ ein Potential mit Vakuumzustand. Die Menge dieser Potentiale bezeichnen wir mit $\mathbb{B}_{\text{vac}}$.

Mit Hilfe der Forderung (2.25) an die Potentiale sind wir in der Lage, folgendes Lemma zu beweisen.

Lemma 2.6:

Sei $\phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ und sei $\Lambda_1 \subset \Lambda_2 \subset \subset \mathbb{Z}^v$. Dann gilt:

a) Ist $\varphi_{\Lambda_1}^\lambda$ Eigenvektor von $U_\phi(\Lambda_1)$ zum Eigenwert λ , dann ist

$$\varphi_{\Lambda_1}^\lambda \otimes \kappa_x^\phi \quad x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1 \quad (2.26)$$

Eigenvektor von $U_\phi(\Lambda_2)$ zum Eigenwert λ .

$$\sigma(U_\phi(\Lambda_1)) \subset \sigma(U_\phi(\Lambda_2)) \quad (2.27)$$

Beweis: Nach der Definition von $U_\phi(\Lambda)$ gilt:

$$U_\phi(\Lambda_2) = \sum_{x \in \Lambda_2} \phi(x) = \sum_{x \in \Lambda_1} \phi(x) + \sum_{\substack{x \in \Lambda_2 \\ x \notin \Lambda_1}} \phi(x)$$

$$= U_{\Phi}(\Lambda_1)^* + \sum_{\substack{X \subset \Lambda_2 \\ X \not\subset \Lambda_1}} \Phi(X) \quad . \quad (2.28)$$

Aus der Voraussetzung $\Phi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ folgt:

$$\sum_{\substack{X \subset \Lambda_2 \\ X \not\subset \Lambda_1}} \Phi(X) (\varphi_{\Lambda_1}^{\lambda} \otimes_{x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1} \kappa_x^{\Phi}) = 0 \quad . \quad (2.29)$$

Damit ist

$$\begin{aligned} U_{\Phi}(\Lambda_2) (\varphi_{\Lambda_1}^{\lambda} \otimes_{x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1} \kappa_x^{\Phi}) &= (U_{\Phi}(\Lambda_1) \varphi_{\Lambda_1}^{\lambda}) \otimes_{x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1} \kappa_x^{\Phi} \\ &= \lambda \varphi_{\Lambda_1}^{\lambda} \otimes_{x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1} \kappa_x^{\Phi} \quad . \end{aligned} \quad (2.30)$$

Q.E.D.

Wenden wir uns nun der Frage zu, was die Definition 2.5 physikalisch beinhaltet. Dazu interpretieren wir am besten das Quantengittersystem als ein Gittergas-Modell und den Vektor κ_x^{Φ} als den Zustand "kein Teilchen im Gitterpunkt x". Dann bedeutet die Gleichung (2.25), daß zwischen einem Gitterpunkt mit Teilchen und einem ohne Teilchen keine Wechselwirkung besteht.

Das Heisenberg-Modell wird durch die Bedingung (2.25) ausgeschlossen, da wegen des Hamiltonoperators (2.2) kein Vektor κ_x existiert. In diesem Modell wird jedoch vorausgesetzt, daß jeder Gitterpunkt mit einem Spin- $\frac{1}{2}$ -Teilchen besetzt ist. Wir verallgemeinern nun das Heisenberg-Modell, indem wir auch zulassen, daß ein Gitterpunkt nicht besetzt ist. Dazu ordnen wir jedem Gitterpunkt $x \in \mathbb{Z}^V$ den neuen Hilbertraum $\mathbb{H}'_x = \mathbb{H}_x \oplus \{\mathbb{C} \kappa_x\}$ zu, wobei

$\mathbb{H}_x$ der Hilbertraum des Heisenberg-Modells ist und χ_x den Zustand "kein Teilchen im Gitterpunkt x " beschreibt. Den Hilbertraum $\mathbb{H}(\Lambda)$ können wir dann als linearen Teilraum von $\mathbb{H}'(\Lambda)$ auffassen. Bezeichne $P_{\mathbb{H}(\Lambda)}$ den $\mathbb{H}(\Lambda)$ entsprechenden Projektionsoperator. Das Potential ϕ' dieses Modells, das dem Potential ϕ des Heisenberg-Modells entspricht, erhalten wir durch die beiden Bedingungen

$$\phi'(\Lambda) P_{\mathbb{H}(\Lambda)} = \phi(\Lambda) \quad , \quad (2.31)$$

$$\phi'(\Lambda) (\chi_a \otimes \varphi_{\Lambda \setminus \{a\}}) = 0 \quad , \quad (2.32)$$

die für alle $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$, alle $a \in \mathbb{Z}^V$ und alle $\varphi_{\Lambda \setminus \{a\}} \in \mathbb{H}'(\Lambda \setminus \{a\})$ gelten sollen. Damit ist automatisch die Bedingung (2.25) erfüllt, und wir sehen, daß sie vom physikalischen Standpunkt aus keine wesentliche Einschränkung in der statistischen Mechanik bedeutet.

Auf der Grundlage der gegebenen Interpretation von χ_x^ϕ führen wir einen Teilchenzahloperator und einen n -Teilchen-Projektionsoperator ein. Dazu wählen wir in jedem Hilbertraum $\mathbb{H}_x$ eine Orthonormalbasis $\{\varphi_x^i : i=1, \dots, K\}$ derart, daß für alle $x \in \mathbb{Z}^V$ $\chi_x^\phi \in \{\varphi_x^i : i=1, \dots, K\}$ ist. Ist $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$, dann ist

$$\left\{ \bigotimes_{x \in \Lambda} \varphi_x^{i_x} : i_x = 1, \dots, K \ ; \ x \in \Lambda \right\} \quad (2.33)$$

eine Orthonormalbasis von $\mathbb{H}(\Lambda)$. Wir bezeichnen mit

$$n_{\chi^\phi} \left(\bigotimes_{x \in \Lambda} \varphi_x^{i_x} \right) \quad (2.34)$$

die Anzahl der $\varphi_x^{i_x}$, die verschieden von χ_x^ϕ sind.

Definition 2.7:

Sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ und sei $\phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$. Dann definieren wir

a) den Teilchenzahloperator $N(\Lambda, \kappa^\phi)$ durch

$$N(\Lambda, \kappa^\phi) \otimes_{x \in \Lambda} \varphi_x^{i_x} = n^{\kappa^\phi} \left(\otimes_{x \in \Lambda} \varphi_x^{i_x} \right) \otimes_{x \in \Lambda} \varphi_x^{i_x}, \quad (2.35)$$

b) für $0 \leq n \leq n(\Lambda)$ den n-Teilchen-Projektionsoperator $P(n, \Lambda, \kappa^\phi)$ durch

$$P(n, \Lambda, \kappa^\phi) \otimes_{x \in \Lambda} \varphi_x^{i_x} = \begin{cases} \otimes_{x \in \Lambda} \varphi_x^{i_x} & \text{wenn } n = n^{\kappa^\phi} \left(\otimes_{x \in \Lambda} \varphi_x^{i_x} \right) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.36)$$

Die wichtigsten Eigenschaften der eben definierten Größen fassen wir in einem Lemma zusammen.

Lemma 2.8:

Sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ und sei $\phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$. Dann gilt:

a) $N(\Lambda, \kappa^\phi)$ ist selbstadjungiert und hat die Spektraldarstellung

$$N(\Lambda, \kappa^\phi) = \sum_{n=0}^{n(\Lambda)} n P(n, \Lambda, \kappa^\phi). \quad (2.37)$$

b) Zu $N(\Lambda, \kappa^\phi)$ existiert ein Potential $\psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa_x^\psi = \kappa_x^\phi$ für alle $x \in \mathbb{Z}^V$, so daß gilt:

$$N(\Lambda, \kappa^\phi) = \sum_{X \subset \Lambda} \psi(X). \quad (2.38)$$

c) Ist $X \subset \Lambda$ und ist $0 \leq n \leq n(\Lambda)$, dann gilt:

$$[P(n, \Lambda, \kappa^\phi), \phi(X)] = 0. \quad (2.39)$$

$$d) \quad [N(\Lambda, \kappa^\Phi), U_\Phi(\Lambda)] = 0 \quad . \quad (2.40)$$

Beweis:

a) Die Behauptung folgt unmittelbar aus der Definition von $N(\Lambda, \kappa^\Phi)$.

b) Wie man sich leicht überzeugen kann, ist

$$N(\Lambda, \kappa^\Phi) = \sum_{x \in \Lambda} N(\{x\}, \kappa^\Phi) \quad . \quad (2.41)$$

Definieren wir nun für alle $x \in \mathbb{Z}^V$ und alle $X \subset \mathbb{Z}^V$ das Potential ψ durch

$$\psi(\{x\}) = N(\{x\}, \kappa^\Phi) \quad \text{und} \quad (2.42)$$

$$\psi(X) = 0 \quad \text{wenn } n(X) \neq 1 \text{ ist,}$$

so ist $\psi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa_x^\psi = \kappa_x^\Phi$ für alle $x \in \mathbb{Z}^V$ und

$$U_\psi(\Lambda) = N(\Lambda, \kappa^\Phi).$$

c) Da nach Lemma 2.4.c

$$P(n, \Lambda, \kappa^\Phi) = \sum_{x \in \Lambda} \left\{ \bigotimes_{x \in \Lambda} P(n_x, \{x\}, \kappa^\Phi) : \sum_{x \in \Lambda} n_x = n \right\} \quad (2.43)$$

ist, genügt es zu zeigen, daß für alle $0 \leq n \leq n(X)$ gilt:

$$[P(n, X, \kappa^\Phi), \phi(X)] = 0 \quad . \quad (2.44)$$

Habe $\phi(X)$ die Spektraldarstellung

$$\phi(X) = \sum_j \alpha_j P(\alpha_j) \quad . \quad (2.45)$$

Da die Projektionsoperatoren zu verschiedenen Eigenwerten eines selbstadjungierten Operators orthogonal sind, folgt aus (2.25), daß für alle $n < n(X)$ und alle $\alpha_j \neq 0$ gilt:

$$P(n, X, \kappa^\phi) P(\alpha_j) = P(\alpha_j) P(n, X, \kappa^\phi) = 0 \quad . \quad (2.46)$$

Damit ist für $n < n(X)$ sowohl

$$P(n, X, \kappa^\phi) \phi(X) = \sum_j \alpha_j P(n, X, \kappa^\phi) P(\alpha_j) = 0 \quad (2.47)$$

als auch

$$\phi(X) P(n, X, \kappa^\phi) = \sum_j \alpha_j P(\alpha_j) P(n, X, \kappa^\phi) = 0 \quad . \quad (2.48)$$

Nun ist

$$P(n(X), X, \kappa^\phi) = 1 - \sum_{n=0}^{n(X)-1} P(n, X, \kappa^\phi) \quad . \quad (2.49)$$

Mit (2.47) und (2.48) ergibt sich also:

$$P(n(X), X, \kappa^\phi) \phi(X) = \phi(X) \quad . \quad (2.50)$$

$$\phi(X) P(n(X), X, \kappa^\phi) = \phi(X) \quad . \quad (2.51)$$

d) Die Behauptung folgt unmittelbar aus der Aussage (c).

Q.E.D.

Wir kommen nun zur Definition der drei Gibbsschen Ensembles.
In der Quantenstatistik läßt sich der Zustand eines endlichen

Systems durch ein positives, normiertes lineares Funktional auf der entsprechenden Observablen-Algebra beschreiben. Da in Quantengittersystemen für $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ $\mathcal{H}(\Lambda)$ endlich-dimensional ist, besteht eine eindeutige Zuordnung zwischen den positiven, normierten linearen Funktionalen ω auf $\mathcal{H}(\Lambda)$ und den positiven selbstadjungierten linearen Operatoren $W \in \mathcal{H}(\Lambda)$ mit $\text{Tr}_{\mathcal{H}(\Lambda)} W = 1$.

Definition 2.9:

Sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$. Sei $\phi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ und habe $U_\phi(\Lambda)$ die Spektraldarstellung

$$U_\phi(\Lambda) = \sum_i \lambda_i^\Lambda P(\lambda_i^\Lambda) \quad . \quad (2.52)$$

Dann definieren wir auf $\mathcal{H}(\Lambda)$

- a) für ein offenes Intervall $I(x) \subset \mathbb{R}$ um $x \in \mathbb{R}$ und $1 \leq n \leq n(\Lambda)$ das mikrokanonische Ensemble durch

$$-w^{\text{mic}}(\Lambda, n, \phi, I(x)) := \frac{P(n, \Lambda, \kappa^\phi) \sum_{\frac{1}{n}\lambda_i^\Lambda \in I(x)} P(\lambda_i^\Lambda)}{\text{Tr}_{\mathcal{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda, \kappa^\phi) \sum_{\frac{1}{n}\lambda_i^\Lambda \in I(x)} P(\lambda_i^\Lambda)} \quad , \quad (2.53)$$

- b) für $\beta \in \mathbb{R}$ und $0 \leq n \leq n(\Lambda)$ das kanonische Ensemble durch

$$w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta) := \frac{P(n, \Lambda, \kappa^\phi) \exp\{-\beta U_\phi(\Lambda)\}}{\text{Tr}_{\mathcal{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda, \kappa^\phi) \exp\{-\beta U_\phi(\Lambda)\}} \quad , \quad (2.54)$$

- c) für $\beta, \mu \in \mathbb{R}$ das großkanonische Ensemble durch

$$w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu) := \frac{\exp\{\beta \mu N(\Lambda, \kappa^\phi) - \beta U_\phi(\Lambda)\}}{\text{Tr}_{\mathcal{H}(\Lambda)} \exp\{\beta \mu N(\Lambda, \kappa^\phi) - \beta U_\phi(\Lambda)\}} \quad . \quad (2.55)$$

Jeder Dichteoperator $W \in \mathcal{H}(\Lambda)$ induziert auf dem Spektrum $\sigma(A)$ jedes selbstadjungierten Operators $A \in \mathcal{H}(\Lambda)$ ein Wahrscheinlichkeitsmaß. Die Wahrscheinlichkeit einer Teilmenge des Spektrums ist gleich dem Erwartungswert des entsprechenden Projektionsoperators in diesem Zustand.

Sei $\psi \in \mathcal{B}$ und habe $U_\psi(\Lambda)$ die Spektraldarstellung

$$U_\psi(\Lambda) = \sum_j \alpha_j^\wedge P(\alpha_j^\wedge) \quad . \quad (2.56)$$

Wir sind in dieser Arbeit an der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_\psi(\Lambda)$ bezüglich der drei Gibbsschen Ensembles im Grenzfall eines unendlich großen Systems interessiert. Dazu werden wir für ein beliebiges offenes Intervall $I \subset \mathbb{R}$ den thermodynamischen Limes der folgenden Ausdrücke untersuchen:

$$\text{Tr}_{\mathcal{H}(\Lambda)} W^{\text{mic}}(\Lambda, n, \phi, I(x)) \sum_{\frac{1}{n}\alpha_j^\wedge \in I} P(\alpha_j^\wedge) \quad . \quad (2.57)$$

$$\text{Tr}_{\mathcal{H}(\Lambda)} W^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta) \sum_{\frac{1}{n}\alpha_j^\wedge \in I} P(\alpha_j^\wedge) \quad . \quad (2.58)$$

$$\text{Tr}_{\mathcal{H}(\Lambda)} W^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu) \sum_{\frac{1}{n}\alpha_j^\wedge \in I} P(\alpha_j^\wedge) \quad . \quad (2.59)$$

Aus beweistechnischen Gründen können wir das asymptotische Verhalten dieser Ausdrücke nur für solche Observablen $U_\psi(\Lambda)$ betrachten, für die $\psi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa_x^\psi = \kappa_x^\phi$ für alle $x \in \mathbb{Z}^V$ ist. Mit anderen Worten, die Potentiale ϕ und ψ müssen einen gemeinsamen Vakuumzustand besitzen.

Für die Bedingung $\kappa_x^\phi = \kappa_x^\psi$ für alle $x \in \mathbb{Z}^V$ schreiben wir abkürzend $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Seien nun $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Dann ist für alle $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$

$$N(\Lambda, \kappa^\phi) = N(\Lambda, \kappa^\psi) \quad . \quad (2.60)$$

Wir vereinbaren für den Rest der Arbeit, daß sich der Teilchenzahl-operator immer auf κ^ϕ mit $\phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ bezieht und bezeichnen ihn mit $N(\Lambda)$. Wegen (2.60) ist dann für alle $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$

$$[U_\phi(\Lambda), N(\Lambda)] = [U_\psi(\Lambda), N(\Lambda)] = 0 \quad . \quad (2.61)$$

Ferner legen wir für den Rest der Arbeit fest, daß die Operatoren $U_\phi(\Lambda)$, $U_\psi(\Lambda)$ und $N(\Lambda)$ die Spektraldarstellungen

$$U_\phi(\Lambda) = \sum_i \lambda_i^\Lambda P(\lambda_i^\Lambda) \quad , \quad (2.62)$$

$$U_\psi(\Lambda) = \sum_j \alpha_j^\Lambda P(\alpha_j^\Lambda) \quad , \quad (2.63)$$

$$N(\Lambda) = \sum_{n=0}^{n(\Lambda)} n P(n, \Lambda) \quad (2.64)$$

haben.

3. DER THERMODYNAMISCHE LIMES

In dieser Arbeit untersuchen wir die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich der drei Gibbsschen Ensembles (2.53), (2.54) und (2.55). Für endliche Systeme sind bis auf spezielle Ψ die entsprechenden Verteilungsfunktionen trivialerweise voneinander verschieden. Im Grenzfall eines unendlich großen Systems jedoch, im sog. thermodynamischen Limes, sind unter bestimmten Voraussetzungen, die unabhängig von Ψ sind, die asymptotischen Verteilungsfunktionen identisch (siehe Kapitel 8). Um also für die Frage der statistischen Äquivalenz der drei Gibbschen Ensembles zu exakten Aussagen zu gelangen, ist es notwendig, den thermodynamischen Limes zu betrachten.

Wir erläutern nun den thermodynamischen Limes am Beispiel des durch das kanonische Ensemble (2.54) definierten statistischen Analogons der Helmholtzschen freien Energie eines Quantengittersystems mit der Wechselwirkung $\phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$. Für endliche Systeme besitzt das statistische Analogon nur annähernd die von der Thermodynamik geforderten Eigenschaften. Sei nun $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^v$, die unendlich groß wird (d.h. $n(\Lambda_k) \rightarrow \infty$), und sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\Lambda_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\Lambda_k)}{n_k} = v. \quad (3.1)$$

Da die Helmholtzsche freie Energie extensiv ist, erwartet man, daß zumindest für bestimmte β und v der folgende Limes

$$\lim_{k \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta n_k} \log \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} P(n_k, \Lambda_k) \exp\{-\beta U_{\phi}(\Lambda_k)\} =: f(v, \phi, \beta) \quad (3.2)$$

existiert und endlich ist. Auf Grund der thermodynamischen Stabilitätsbedingungen erwartet man weiter, daß $f(v, \phi, \beta)$ eine in v konvexe und in $\frac{1}{\beta}$ konkave Funktion ist.

Die Existenz des thermodynamischen Limes der thermodynamischen Eigenschaften eines Systems wechselwirkender Teilchen wurde erstmals von van Hove [52] für ein klassisches Gas im kanonischen Ensemble diskutiert. Heute kann man sowohl für klassische als auch für quantenmechanische Systeme zeigen, daß unter bestimmten Voraussetzungen die thermodynamischen Limites der durch die drei Gibbsschen Ensembles definierten spezifischen statistischen Analoga thermodynamischer Potentiale existieren und die Grenzfunktionen die von der Thermodynamik geforderten Eigenschaften besitzen [44] .

Im Zusammenhang mit dem thermodynamischen Limes (3.2) taucht die natürliche Frage auf, ob der Limes für jede Folge $\{\Lambda_k\}$, die unendlich groß wird, existiert und wenn ja, ob die Grenzwerte für alle Folgen gleich sind. Im allgemeinen kann man nicht beweisen, daß die thermodynamischen Limites einer spezifischen Größe für alle Folgen $\{\Lambda_k\}$, die unendlich groß werden, existieren und gleich sind. Für fast alle Größen kann man aber zeigen, daß die thermodynamischen Limites für Folgen von Parallelepipeden, deren Kanten unendlich groß werden, existieren und gleich sind. Für manche Größen kann man dies auch für allgemeinere Folgen beweisen. In dieser Arbeit benötigen wir drei verschiedene Begriffe des "unendlich groß Werdens". Dazu führen wir für $a = (a_1, \dots, a_v) \in \mathbb{N}^v$ die folgenden Bezeichnungen ein:

$$\Lambda(a) := \{ x \in \mathbb{Z}^v : 0 \leq x_i < a_i, i=1, \dots, v \} . \quad (3.3)$$

$$n(a) := \prod_{i=1}^v a_i \quad (3.4)$$

Definition 3.1:

Wir sagen, eine Folge $\{\Lambda_k\}$ endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^v$ wird wie Parallelepipede unendlich groß, wenn eine Folge $\{\tau_k\}$ von Translationen und eine Folge $\{a_k\}$ von v -Tupeln $a_k = (a_{1k}, \dots, a_{vk})$ natürlicher Zahlen derart existieren, daß gilt:

$$(i) \quad \tau_k \Lambda_k = \Lambda(a_k) \quad \text{für alle } k \in \mathbb{N} \quad . \quad (3.5)$$

$$(ii) \quad \lim_{k \rightarrow \infty} a_{ik} = \infty \quad \text{für alle } i=1, \dots, v \quad . \quad (3.6)$$

Translieren wir $\Lambda(a)$ durch den Vektor $ra = (r_1 a_1, \dots, r_v a_v) \in \mathbb{Z}^v$ mit $r \in \mathbb{Z}^v$, so erhalten wir die Menge

$$\Lambda^r(a) = \Lambda(a) + ra \quad . \quad (3.7)$$

Die Familie $\{\Lambda^r(a) : r \in \mathbb{Z}^v\}$ bildet eine Zerlegung von $\mathbb{Z}^v$. Für jedes $\Lambda \subset \mathbb{Z}^v$ bezeichnen wir mit $n_a^+(\Lambda)$ bzw. $n_a^-(\Lambda)$ die Anzahl der Mengen $\Lambda^r(a)$ mit $\Lambda^r(a) \cap \Lambda \neq \emptyset$ bzw. $\Lambda^r(a) \subset \Lambda$.

Definition 3.2:

Wir sagen, eine Folge $\{\Lambda_k\}$ endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^v$ wird im Sinne von van Hove unendlich groß, wenn für alle $a \in \mathbb{N}^v$ gilt:

$$(i) \quad \lim_{k \rightarrow \infty} n_a^-(\Lambda_k) = \infty \quad . \quad (3.8)$$

$$(ii) \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n_a^-(\Lambda_k)}{n_a^+(\Lambda_k)} = 1 \quad . \quad (3.9)$$

Lemma 3.3 [27]:

Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^v$, die im Sinne von van Hove unendlich groß wird, und sei Δ ein rechtwinkliges Parallelepiped. Bezeichnet m_k die größte Anzahl nicht-überlappender Translierter von Δ , die in Λ_k plaziert werden können,

so gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{m_k n(\Delta)}{n(\Delta_k)} = 1 \quad . \quad (3.10)$$

Definition 3.4:

Wir sagen, eine Folge $\{\Delta_k\}$ endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$ wird im Sinne von Lanford unendlich groß, wenn $\{\Delta_k\}$ im Sinne von van Hove unendlich groß wird und wenn eine Folge $\{\Delta_k\}$ rechtwinkliger Parallelepipede $\Delta_k = \Delta(a_k) + r_k$, $a_k, r_k \in \mathbb{Z}^V$ für alle $k \in \mathbb{N}$, derart existiert, daß gilt:

$$(i) \quad \Delta_k \subset \Delta_k \quad \text{für alle } k \in \mathbb{N} \quad . \quad (3.11)$$

$$(ii) \quad \liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\Delta_k)}{n(\Delta_k)} = 0 \quad . \quad (3.12)$$

Aus den Definitionen 3.1, 3.2 und 3.4 ergibt sich unmittelbar, daß die darin definierten Begriffe des "unendlich groß Werdens" in folgendem Verhältnis zueinander stehen:

$\{\Delta_k\}$ wird wie Parallelepipede unendlich groß.



$\{\Delta_k\}$ wird im Sinne von Lanford unendlich groß.



$\{\Delta_k\}$ wird im Sinne von van Hove unendlich groß.

An zwei Beispielen machen wir uns klar, daß diese drei Begriffe verschieden voneinander sind, daß also keiner der obigen Pfeile umgedreht werden kann.

Beispiel 1: Sei für alle $k \in \mathbb{N}$

$$\Lambda_k = \{ (x_1, \dots, x_v) \in \mathbb{Z}^v : \sum_{i=1}^v x_i^2 < k^2 \} . \quad (3.13)$$

Dann wird die Folge $\{ \Lambda_k \}$ im Sinne von Lanford unendlich groß,
nicht jedoch wie Parallelepipede .

Beispiel 2: Sei für alle $k \in \mathbb{N}$

$$\Lambda_k = \{ (x_1, \dots, x_v) \in \mathbb{Z}^v : k - k^{1/2} < \left(\sum_{i=1}^v x_i^2 \right)^{1/2} < k \} . \quad (3.14)$$

Dann wird die Folge $\{ \Lambda_k \}$ im Sinne von van Hove unendlich groß,
nicht jedoch im Sinne von Lanford.

4. DAS MIKROKANONISCHE ENSEMBLE

In diesem Kapitel untersuchen wir den thermodynamischen Limes der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des mikrokanonischen Ensembles $W^{\text{mic}}(\Lambda, n, \Phi, I(x))$. Zunächst führen wir in Paragraph 4.1 für endliche Systeme die Größe $\Omega(\Lambda, n, \Phi, \Psi, J)$ ein, aus der sich die Wahrscheinlichkeitsverteilung ermitteln läßt. In Paragraph 4.2 zeigen wir die Existenz des thermodynamischen Limes von $\frac{1}{n} \log \Omega(\Lambda, n, \Phi, \Psi, J)$ für eine spezielle Folge von Parallelepipeden. Mit Hilfe einiger in Paragraph 4.3 bewiesener Eigenschaften der Grenzfunktion $s(v, \Phi, \Psi, J)$ beweisen wir dann in Paragraph 4.4 die Existenz des thermodynamischen Limes für Folgen, die im Sinne von Lanford unendlich groß werden. In Paragraph 4.5 zeigen wir, daß die spezifische mikrokanonische Entropie ein Spezialfall von $s(v, \Phi, \Psi, J)$ ist. Zum Abschluß leiten wir dann in Paragraph 4.6 aus $s(v, \Phi, \Psi, J)$ die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich $W^{\text{mic}}(\Lambda, n, \Phi, I(x))$ im Grenzfall eines unendlich großen Systems ab. Um zu exakten Aussagen zu gelangen, lassen wir das Intervall $I(x)$ gegen $\{x\}$ streben.

4.1 DIE WAHRSCHEINLICHKEITSVERTEILUNG EINER SPEZIFISCHEN OBSERVAB- LEN BEZÜGLICH DES MIKROKANONISCHEN ENSEMBLES

Um die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des mikrokanonischen Ensembles $W^{\text{mic}}(\Lambda, n, \Phi, I(x))$ bestimmen zu können, genügt es sicherlich, wenn wir für alle offenen Intervalle $I \subset \mathbb{R}$ die Gesamtwahrscheinlichkeit aller Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_{\Psi}(\Lambda)$, die in dem Intervall I liegen, kennen. Wir werden nun diese Gesamtwahrscheinlichkeit für ein beliebiges offenes Intervall untersuchen.

Zunächst fassen wir unsere Voraussetzungen zusammen. Sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$. Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\chi^\phi = \chi^\psi$. Die entsprechenden Observablen $U_\phi(\Lambda)$ und $U_\psi(\Lambda)$ haben vereinbarungsgemäß die Spektraldarstellungen (2.62) und (2.63). Sei $1 \leq n \leq n(\Lambda)$. Sei $I(x) \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall um $x \in \mathbb{R}$.

Das mikrokanonische Ensemble

$$w^{\text{mic}}(\Lambda, n, \phi, I(x)) = \frac{P(n, \Lambda) \sum_{\frac{1}{n}\lambda_i^\Lambda \in I(x)} P(\lambda_i^\Lambda)}{\text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) \sum_{\frac{1}{n}\lambda_i^\Lambda \in I(x)} P(\lambda_i^\Lambda)} \quad (4.1)$$

induziert auf dem Spektrum $\sigma(\frac{1}{n}U_\psi(\Lambda))$ von $\frac{1}{n}U_\psi(\Lambda)$ ein Wahrscheinlichkeitsmaß. Sei $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall. Dann ist die Wahrscheinlichkeit von $\sigma(\frac{1}{n}U_\psi(\Lambda)) \cap I$ bezüglich $w^{\text{mic}}(\Lambda, n, \phi, I(x))$ durch

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} w^{\text{mic}}(\Lambda, n, \phi, I(x)) &= \sum_{\frac{1}{n}\alpha_j^\Lambda \in I} P(\alpha_j^\Lambda) \\ &= \frac{\text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) \sum_{\frac{1}{n}\lambda_i^\Lambda \in I(x)} \sum_{\frac{1}{n}\alpha_j^\Lambda \in I} P(\lambda_i^\Lambda) P(\alpha_j^\Lambda)}{\text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) \sum_{\frac{1}{n}\lambda_i^\Lambda \in I(x)} P(\lambda_i^\Lambda)} \quad (4.2) \end{aligned}$$

gegeben. Um den thermodynamischen Limes dieser Wahrscheinlichkeit (4.2) zu untersuchen, ist es zweckmäßig, folgende Größe einzuführen.

Definition 4.1:

Sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$. Seien $\Phi, \Psi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\Phi = \kappa^\Psi$. Sei $1 \leq n \leq n(\Lambda)$. Sei $J \subset \mathbb{R}^2$ offen und konvex. Dann definieren wir:

$$\Omega(\Lambda, n, \Phi, \Psi, J) := \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) \sum_{\frac{1}{n}(\lambda_i^\Lambda, \alpha_j^\Lambda) \in J} P(\lambda_i^\Lambda) P(\alpha_j^\Lambda) . \quad (4.3)$$

Wegen (2.61) gilt für alle $\Phi, \Psi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\Phi = \kappa^\Psi$, alle $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$, alle $1 \leq n \leq n(\Lambda)$ und alle $J \subset \mathbb{R}^2$:

$$\Omega(\Lambda, n, \Phi, \Psi, J) \geq 0 . \quad (4.4)$$

Mit der Definition 4.1 läßt sich die Wahrscheinlichkeit (4.2) auch schreiben:

$$\text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} W^{\text{mic}}(\Lambda, n, \Phi, I(x)) \sum_{\frac{1}{n}\alpha_j^\Lambda \in I} P(\alpha_j^\Lambda) = \frac{\Omega(\Lambda, n, \Phi, \Psi, I(x) \times I)}{\Omega(\Lambda, n, \Phi, \Psi, I(x) \times \mathbb{R})} . \quad (4.5)$$

Wir werden in den nächsten Paragraphen den thermodynamischen Limes von $\frac{1}{n} \log \Omega(\Lambda, n, \Phi, \Psi, J)$ untersuchen. Dazu benötigen wir zwei Lemmata, in die die Bedingung $\Phi, \Psi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\Phi = \kappa^\Psi$ entscheidend eingeht.

Lemma 4.2:

Sei $\Lambda_1 \subset \Lambda_2 \subset \mathbb{Z}^V$. Dann gilt:

$$\Omega(\Lambda_1, n, \Phi, \Psi, J) \leq \Omega(\Lambda_2, n, \Phi, \Psi, J) . \quad (4.6)$$

Beweis: Bezeichne $m(\lambda_i^\wedge)$ bzw. $m(\alpha_j^\wedge)$ die Vielfachheit des Eigenwerts $\lambda_i^\wedge$ bzw. $\alpha_j^\wedge$. Sei

$$\{ \varphi_{k_i}^{\lambda_i^\wedge} : k_i = 1, \dots, m(\lambda_i^\wedge) \} \quad (4.7)$$

bzw.

$$\{ \varphi_{1_j}^{\alpha_j^\wedge} : 1_j = 1, \dots, m(\alpha_j^\wedge) \} \quad (4.8)$$

eine Orthonormalbasis von $P(\lambda_i^\wedge) H(\Lambda)$ bzw. $P(\alpha_j^\wedge) H(\Lambda)$. Dann ist

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_{H(\Lambda)} P(n, \Lambda) P(\lambda_i^\wedge) P(\alpha_j^\wedge) \\ &= \sum_{k_i=1}^{m(\lambda_i^\wedge)} \sum_{1_j=1}^{m(\alpha_j^\wedge)} | (P(n, \Lambda) \varphi_{k_i}^{\lambda_i^\wedge}, P(n, \Lambda) \varphi_{1_j}^{\alpha_j^\wedge}) |^2 \end{aligned} \quad (4.9)$$

Also gilt:

$$\begin{aligned} \Omega(\Lambda, n, \Phi, \Psi, J) &= \\ &= \sum_{\substack{1(\lambda_i^\wedge, \alpha_j^\wedge) \in J}} \sum_{k_i=1}^{m(\lambda_i^\wedge)} \sum_{1_j=1}^{m(\alpha_j^\wedge)} | (P(n, \Lambda) \varphi_{k_i}^{\lambda_i^\wedge}, P(n, \Lambda) \varphi_{1_j}^{\alpha_j^\wedge}) |^2 \end{aligned} \quad (4.10)$$

Ist nun $\Lambda_1 \subset \Lambda_2$, so folgt aus Lemma 2.6:

$$\begin{aligned} & \Omega(\Lambda_1, n, \Phi, \Psi, J) \\ &= \sum_{\substack{1(\lambda_i^{\wedge 1}, \alpha_j^{\wedge 1}) \in J}} \sum_{k_i=1}^{m(\lambda_i^{\wedge 1})} \sum_{1_j=1}^{m(\alpha_j^{\wedge 1})} | (P(n, \Lambda_1) \varphi_{k_i}^{\lambda_i^{\wedge 1}}, P(n, \Lambda_1) \varphi_{1_j}^{\alpha_j^{\wedge 1}}) |^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{\frac{1}{n}(\lambda_i^{\wedge 1}, \alpha_j^{\wedge 1}) \in J} \sum_{k_i=1}^{m(\lambda_i^{\wedge 1})} \sum_{l_j=1}^{m(\alpha_j^{\wedge 1})} \\
 &\quad \left| \left(P(n, \wedge_2) \varphi_{k_i}^{\lambda_i^{\wedge 1}} \right)_{x \in \wedge_2^{\otimes} \wedge_1} \chi_x^{\phi}, \left(P(n, \wedge_2) \varphi_{l_j}^{\alpha_j^{\wedge 1}} \right)_{x \in \wedge_2^{\otimes} \wedge_1} \chi_x^{\phi} \right|^2 \\
 &= \sum_{\frac{1}{n}(\lambda_i^{\wedge 2}, \alpha_j^{\wedge 2}) \in J} \sum_{k_i=1}^{m(\lambda_i^{\wedge 2})} \sum_{l_j=1}^{m(\alpha_j^{\wedge 2})} \left| \left(P(n, \wedge_2) \varphi_{k_i}^{\lambda_i^{\wedge 2}} \right), \left(P(n, \wedge_2) \varphi_{l_j}^{\alpha_j^{\wedge 2}} \right) \right|^2 \\
 &= \Omega(\wedge_2, n, \phi, \psi, J) \quad . \quad (4.11)
 \end{aligned}$$

Q.E.D.

Lemma 4.3:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\chi^{\phi} = \chi^{\psi}$, und sei R das Maximum der Reichweiten von ϕ und ψ . Seien $\wedge_1, \dots, \wedge_k \subset \mathbb{Z}^V$ derart, daß der Abstand von $\wedge_i$ zu $\wedge_j$ für $i \neq j$ größer als R ist. Seien $n_1, \dots, n_k$ natürliche Zahlen mit $n_i \leq n(\wedge_i)$ für $i=1, \dots, k$. Seien $J_1, \dots, J_k \subset \mathbb{R}^2$ offen und konvex. Bezeichne

$$\wedge = \bigcup_{i=1}^k \wedge_i, \quad n = \sum_{i=1}^k n_i \quad \text{und} \quad J = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^k n_i J_i \quad . \quad (4.12)$$

Dann gilt:

$$\Omega(\wedge, n, \phi, \psi, J) \geq \prod_{i=1}^k \Omega(\wedge_i, n_i, \phi, \psi, J_i) \quad . \quad (4.13)$$

Beweis: Da für $i \neq j$ die Λ_i und Λ_j entsprechenden Teilsysteme nicht miteinander wechselwirken, gilt nach Lemma 2.4.a:

$$U_{\phi}(\Lambda) = \sum_{i=1}^k U_{\phi}(\Lambda_i) \quad . \quad (4.14)$$

$$U_{\psi}(\Lambda) = \sum_{i=1}^k U_{\psi}(\Lambda_i) \quad . \quad (4.15)$$

Nach Lemma 2.4.c gilt für $\lambda^{\wedge} \in \sigma(U_{\phi}(\Lambda))$:

$$P(\lambda^{\wedge}) = \sum \left\{ \bigotimes_{i=1}^k P(\lambda^{\wedge i}) : \lambda^{\wedge i} \in \sigma(U(\Lambda_i)) \text{ mit } \lambda^{\wedge} = \sum_{i=1}^k \lambda^{\wedge i} \right\}. \quad (4.16)$$

Die analogen Aussagen gelten für $P(\alpha^{\wedge})$ mit $\alpha^{\wedge} \in \sigma(U_{\psi}(\Lambda))$ und $P(n, \Lambda)$, so daß wir erhalten:

$$\Omega(\Lambda, n, \phi, \psi, J) = \sum_{\frac{1}{n}(\lambda^{\wedge}, \alpha^{\wedge}) \in J} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) P(\lambda^{\wedge}) P(\alpha^{\wedge})$$

$$\cong \sum_{\frac{1}{n_1}(\lambda^{\wedge 1}, \alpha^{\wedge 1}) \in J_1} \dots \sum_{\frac{1}{n_k}(\lambda^{\wedge k}, \alpha^{\wedge k}) \in J_k}$$

$$\text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} \bigotimes_{i=1}^k P(n_i, \Lambda_i) \bigotimes_{i=1}^k P(\lambda^{\wedge i}) \bigotimes_{i=1}^k P(\alpha^{\wedge i})$$

$$\cong \sum_{\frac{1}{n_1}(\lambda^{\wedge 1}, \alpha^{\wedge 1}) \in J_1} \dots \sum_{\frac{1}{n_k}(\lambda^{\wedge k}, \alpha^{\wedge k}) \in J_k}$$

$$\prod_{i=1}^k \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_i)} P(n_i, \Lambda_i) P(\lambda^{\wedge i}) P(\alpha^{\wedge i})$$

$$= \prod_{i=1}^k \Omega(\wedge_i, n_i, \Phi, \Psi, J_i) \quad (4.17)$$

Q.E.D.

4.2 DER THERMODYNAMISCHE LIMES FÜR EINE SPEZIELLE FOLGE VON PARALLELEPIPEDEN

Der Beweis der Existenz des thermodynamischen Limes von $\frac{1}{n} \log \Omega(\wedge, n, \Phi, \Psi, J)$ ist charakteristisch für fast alle Beweise solcher Aussagen. Zunächst betrachten wir eine spezielle Folge von Parallelepipeden, für die wir die Existenz des thermodynamischen Limes mittels einer Aussage über superadditive Funktionen zeigen können. Sodann bestimmen wir einige Eigenschaften der Grenzfunktion (Paragraph 4.3), um mit deren Hilfe zu beweisen, daß der Limes nicht von der besonderen Wahl der Folge abhängig ist (Paragraph 4.4).

Lemma 4.4 [44]:

Sei $h : \mathbb{N}^v \rightarrow \mathbb{R}$ superadditiv in jeder Komponente, d.h. für alle $i=1, \dots, v$ sei

$$\begin{aligned} & h(a_1, \dots, b_i + c_i, \dots, a_v) \\ & \cong h(a_1, \dots, b_i, \dots, a_v) + h(a_1, \dots, c_i, \dots, a_v) \quad (4.18) \end{aligned}$$

Dann existiert der folgende Limes und es gilt:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{h(r)}{n(r)} = \sup_{r \in \mathbb{N}^v} \frac{h(r)}{n(r)} \quad (4.19)$$

wobei $r = (r_1, \dots, r_v) \rightarrow \infty$ bedeutet, daß $r_i \rightarrow \infty$ für alle $i=1, \dots, v$. (Der Wert $+\infty$ ist als Grenzwert zugelassen).

Wir konstruieren uns nun eine spezielle Folge von Parallelepipeden, für die wir die Existenz des thermodynamischen Limes von $\frac{1}{n} \log \Omega(\Lambda, n, \phi, \psi, J)$ mit Hilfe von Lemma 4.4 zeigen können. Sei R das Maximum der Reichweiten von ϕ und ψ . Für jedes v -Tupel $r \in \mathbb{N}^v$ und jedes $v \in [1, \infty)$ definieren wir:

$$\Lambda_v(r) := \{ (x_1, \dots, x_v) \in \mathbb{Z}^v : 0 \leq x_i \leq r_i v^{\frac{1}{v}-1}, i=1, \dots, v \}. \quad (4.20)$$

Ist für ein i $r_i v^{\frac{1}{v}-1} < 0$, so definieren wir: $\Lambda_v(r) = \emptyset$. Wir untersuchen nun das Verhalten von $\Omega(\Lambda_v(r), n(r), \phi, \psi, J)$ für $r \rightarrow \infty$. Da

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{n(\Lambda_v(r))}{n(r)} = v \quad (4.21)$$

ist, erhalten wir im Grenzfall die richtige Dichte $\frac{1}{v}$.

Lemma 4.5:

Wählen wir $a, b, c \in \mathbb{N}^v$ derart, daß für ein $i=1, \dots, v$

$$\begin{aligned} a &= (c_1, \dots, a_i, \dots, c_v), \\ b &= (c_1, \dots, b_i, \dots, c_v), \\ c &= (c_1, \dots, a_i + b_i, \dots, c_v) \end{aligned} \quad (4.22)$$

ist, dann gilt:

$$\begin{aligned} &\Omega(\Lambda_v(c), n(c), \phi, \psi, J) \\ &\cong \Omega(\Lambda_v(a), n(a), \phi, \psi, J) \cdot \Omega(\Lambda_v(b), n(b), \phi, \psi, J) \quad . \end{aligned} \quad (4.23)$$

Beweis: Die Parallelepipede $\Lambda_v(a)$, $\Lambda_v(b)$ und $\Lambda_v(c)$ unterscheiden sich nur in der i -ten Komponente. Bezeichnen wir für diesen

Beweis mit $[x]$ die größte ganze Zahl kleiner oder gleich x , so ist

$$[(a_i + b_i)v^{\frac{1}{N}} - R - 1] \leq [a_i v^{\frac{1}{N}} - R - 1] + [b_i v^{\frac{1}{N}} - R - 1] + [R + 1]. \quad (4.24)$$

Damit können wir in $\Lambda_v(c)$ je eine Translierte von $\Lambda_v(a)$ und von $\Lambda_v(b)$ so plazieren, daß sie einen Abstand größer als R haben. Mit den Lemmata 4.2 und 4.3 folgt dann unmittelbar die Behauptung.

Q.E.D.

Um Lemma 4.4 auf $\log \Omega(\Lambda_v(r), n(r), \phi, \psi, J)$ anwenden zu können, benötigen wir noch einige Betrachtungen über superadditive Funktionen. Denn $\Omega(\Lambda_v(r), n(r), \phi, \psi, J)$ kann möglicherweise für ein $r \in \mathbb{N}^V$ Null sein. Lemma 4.4 gilt jedoch nicht, wenn $h(r)$ den Wert $-\infty$ annehmen kann.

Für alle $j, r \in \mathbb{Z}^V$ bezeichnen wir $(j_1 r_1, \dots, j_v r_v) \in \mathbb{Z}^V$ mit jr . Ist für ein $r_0 \in \mathbb{N}^V$ $h(r_0) > -\infty$, dann folgt aus der Superadditivität, daß auch $h(jr_0) > -\infty$ für alle $j \in \mathbb{N}^V$ ist. Mit Lemma 4.4 gilt:

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{h(jr_0)}{n(jr_0)} = \sup_{j \in \mathbb{N}^V} \frac{h(jr_0)}{n(jr_0)}. \quad (4.25)$$

Dieser Grenzwert ist unabhängig von r_0 . Seien $h(r_0) > -\infty$ und $h(r'_0) > -\infty$. Dann ist $h(r'_0 r_0) > -\infty$ und $\{jr'_0 r_0\}$ ist sowohl eine Teilfolge von $\{jr_0\}$ als auch von $\{jr'_0\}$. Da die Limites

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{h(jr_0)}{n(jr_0)}, \quad (4.26)$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{h(jr'_0)}{n(jr'_0)}, \quad (4.27)$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{h(jr_0 r'_0)}{n(jr_0 r'_0)} \quad (4.28)$$

alle existieren, müssen sie gleich sein. Da ferner

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{h(jr_0)}{n(jr_0)} \equiv \frac{h(r'_0)}{n(r'_0)} \quad (4.29)$$

ist, können wir diesen Limes durch

$$\sup_{r \in \mathbb{N}^V} \frac{h(r)}{n(r)} \quad (4.30)$$

berechnen. Dies führt uns zu folgender Definition und Bemerkung.

Definition 4.6:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Sei $J \subset \mathbb{R}^2$ offen und konvex. Sei $v \in [1, \infty)$. Dann definieren wir die verallgemeinerte spezifische mikrokanonische Entropie durch

$$s(v, \phi, \psi, J) := \sup_{r \in \mathbb{N}^V} \frac{1}{n(r)} \log \Omega(\wedge_v(r), n(r), \phi, \psi, J) \quad (4.31)$$

Bemerkung 4.7:

Ist $s(v, \phi, \psi, J) > -\infty$, dann gilt

$$s(v, \phi, \psi, J) = \lim_{j \rightarrow \infty} \frac{1}{n(jr_0)} \log \Omega(\wedge_v(jr_0), n(jr_0), \phi, \psi, J) \quad (4.32)$$

für alle $r_0 \in \mathbb{N}^V$, für die $\Omega(\wedge_v(r_0), n(r_0), \phi, \psi, J) > 0$ ist.

4.3 EIGENSCHAFTEN DER VERALLGEMEINERTEN SPEZIFISCHEN MIKROKANONISCHEN ENTROPIE

Zunächst ist unser Ziel, von der Mengenfunktion $s(v, \phi, \psi, J)$ zu einer punktweise definierten Funktion $s(v, \phi, \psi, x, y)$ zu kommen.

Definition 4.8:

Eine auf einem topologischen Raum E definierte Funktion f mit Werten in $\mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ heißt halbstetig von oben, wenn für alle $a \in \mathbb{R}$ $\{x \in E : f(x) < a\}$ offen ist.

Lemma 4.9 [27]:

Sei $s(J)$ eine auf den konvexen offenen Teilmengen von $\mathbb{R}^V$ definierte Mengenfunktion mit Werten in $\mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ derart, daß für alle konvexen offenen $J, J_1, J_2 \in \mathbb{R}^V$ gilt:

$$(i) \quad s(J_1 \cup J_2) = \max \{ s(J_1), s(J_2) \} \quad . \quad (4.33)$$

$$(ii) \quad s(J) = \sup \{ s(J_0) : J_0 \text{ beschränkt, } \overline{J_0} \subset J \} \quad . \quad (4.34)$$

Definieren wir für jedes $x \in \mathbb{R}^V$ die Funktion $s(x)$ durch

$$s(x) := \inf \{ s(J) : x \in J \} \quad , \quad (4.35)$$

dann ist $s(x)$ auf $\mathbb{R}^V$ halbstetig von oben und es gilt:

$$s(J) = \sup \{ s(x) : x \in J \} \quad . \quad (4.36)$$

Lemma 4.10:

Seien $J_i \subset \mathbb{R}^2$ offen und konvex, $i=1, \dots, k$. Sei $J = J_1 \cup \dots \cup J_k$.

Dann gilt:

$$s(v, \phi, \psi, J) = \sup \{ s(v, \phi, \psi, J_i) : i=1, \dots, k \} \quad . \quad (4.37)$$

Beweis: Für jedes $r \in \mathbb{N}^V$ gilt:

$$\begin{aligned} & \sup \{ \Omega(\wedge_v(r), n(r), \Phi, \Psi, J_i) : i=1, \dots, k \} \\ & \cong \Omega(\wedge_v(r), n(r), \Phi, \Psi, J) \\ & \cong k \sup \{ \Omega(\wedge_v(r), n(r), \Phi, \Psi, J_i) : i=1, \dots, k \} \quad . \end{aligned} \quad (4.38)$$

Nimmt man den Logarithmus, dividiert durch $n(r)$ und betrachtet den Limes $j \rightarrow \infty$ für eine geeignete Teilfolge $\{j_{r_0}\}$, so erhält man die Behauptung.

Q.E.D.

Lemma 4.11:

Für jedes konvexe offene $J \subset \mathbb{R}^2$ gilt:

$$s(v, \Phi, \Psi, J) = \sup \{ s(v, \Phi, \Psi, J_0) : J_0 \text{ beschränkt, } \overline{J_0} \subset J \}. \quad (4.39)$$

Beweis: Mit Lemma 4.10 gilt:

$$s(v, \Phi, \Psi, J) \geq \sup \{ s(v, \Phi, \Psi, J_0) : J_0 \text{ beschränkt, } \overline{J_0} \subset J \}. \quad (4.40)$$

Ist $s(v, \Phi, \Psi, J) = -\infty$, so sind wir fertig. Nehmen wir also an, daß $s(v, \Phi, \Psi, J) > -\infty$ ist und sei $\varepsilon > 0$. Wir wählen nun ein $r_0 \in \mathbb{N}^V$ derart, daß

$$\frac{1}{n(r_0)} \log \Omega(\wedge_v(r_0), n(r_0), \Phi, \Psi, J) > s(v, \Phi, \Psi, J) - \varepsilon \quad (4.41)$$

ist und nehmen eine beschränkte, konvexe offene Menge $J_0 \subset \mathbb{R}^2$ mit $\overline{J_0} \subset J$ derart, daß gilt:

$$\Omega(\Lambda_v(r_0), n(r_0), \phi, \psi, J_0) = \Omega(\Lambda_v(r_0), n(r_0), \phi, \psi, J) . \quad (4.42)$$

Dies ist für jedes $r_0 \in \mathbb{N}^V$ immer möglich, da die Spektren von $U_\phi(\Lambda_v(r_0))$ und von $U_\psi(\Lambda_v(r_0))$ nur endlich viele Punkte haben. Damit ist

$$\begin{aligned} s(v, \phi, \psi, J_0) &\cong \frac{1}{n(r_0)} \log \Omega(\Lambda_v(r_0), n(r_0), \phi, \psi, J_0) \\ &= \frac{1}{n(r_0)} \log \Omega(\Lambda_v(r_0), n(r_0), \phi, \psi, J) \\ &> s(v, \phi, \psi, J) - \varepsilon . \end{aligned} \quad (4.43)$$

Da $\varepsilon > 0$ beliebig war, gilt also:

$$s(v, \phi, \psi, J) \cong \sup \{ s(v, \phi, \psi, J_0) : J_0 \text{ beschränkt, } \overline{J_0} \subset J \} . \quad (4.44)$$

Q.E.D.

Mit den beiden letzten Lemmata sind die Voraussetzungen von Lemma 4.9 erfüllt. Dies führt uns zu

Definition 4.12:

Für jedes $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ definieren wir:

$$s(v, \phi, \psi, x, y) := \inf \{ s(v, \phi, \psi, J) : J \subset \mathbb{R}^2, (x, y) \in J \} . \quad (4.45)$$

Satz 4.13:

$s(v, \phi, \psi, x, y)$ ist in (x, y) auf $\mathbb{R}^2$ halbstetig von oben und es gilt:

$$s(v, \phi, \psi, J) = \sup \{ s(v, \phi, \psi, x, y) : (x, y) \in J \} . \quad (4.46)$$

Beweis: Die Behauptung folgt unmittelbar aus Lemma 4.9 mit den Lemmata 4.10 und 4.11 .

Q.E.D.

Satz 4.14:

$s(v, \phi, \psi, x, y)$ ist in (x, y) auf $\mathbb{R}^2$ konkav und gleichmäßig von oben beschränkt mit

$$s(v, \phi, \psi, x, y) \leq v \log K \quad . \quad (4.47)$$

($K = \dim H_a$, $a \in \mathbb{Z}^V$).

Beweis:

a) Obere Schranke: Für jedes $r \in \mathbb{N}^V$ ist

$$\begin{aligned} \Omega(\wedge_v(r), n(r), \phi, \psi, J) &= \\ &= \sum_{\substack{(\lambda_i^{\wedge_v(r)}, \alpha_j^{\wedge_v(r)}) \in J}} \text{Tr}_{H(\wedge_v(r))} P(n(r), \wedge_v(r)) P(\lambda_i^{\wedge_v(r)}) P(\alpha_j^{\wedge_v(r)}) \\ &\leq \text{Tr}_{H(\wedge_v(r))} 1 \\ &= K^{n(\wedge_v(r))} \quad , \end{aligned} \quad (4.48)$$

womit für jedes $r \in \mathbb{N}^V$ gilt:

$$\frac{1}{n(r)} \log \Omega(\wedge_v(r), n(r), \phi, \psi, J) \leq \frac{n(\wedge_v(r))}{n(r)} \log K \quad . \quad (4.49)$$

Betrachten wir den Limes $j \rightarrow \infty$ für eine geeignete Teilfolge $\{j_r\}$ und berücksichtigen (4.21), so erhalten wir (4.47).

b) Konkavität: Da wir in $\Lambda_v(r_1, \dots, 2r_1, \dots, r_v)$ zwei Translierte von $\Lambda_v(r)$ mit einem Abstand größer als R plazieren können (siehe (4.24)), gilt mit den Lemmata 4.2 und 4.3 für zwei beliebige konvexe offene $J_1, J_2 \subset \mathbb{R}^2$:

$$\begin{aligned} & \Omega(\Lambda_v(r_1, \dots, 2r_1, \dots, r_v), 2n(r), \phi, \psi, \frac{1}{2}J_1 + \frac{1}{2}J_2) \\ & \cong \Omega(\Lambda_v(r), n(r), \phi, \psi, J_1) \cdot \Omega(\Lambda_v(r), n(r), \phi, \psi, J_2) \quad . \end{aligned} \quad (4.50)$$

Nimmt man den Logarithmus, dividiert durch $2n(r)$ und betrachtet den Limes $j \rightarrow \infty$ einer geeigneten Teilfolge $\{j r_0\}$, so erhält man:

$$s(v, \phi, \psi, \frac{1}{2}J_1 + \frac{1}{2}J_2) \cong \frac{1}{2} s(v, \phi, \psi, J_1) + \frac{1}{2} s(v, \phi, \psi, J_2) \quad . \quad (4.51)$$

Läßt man J_1 bzw. J_2 zu einem Punkt (x_1, y_1) bzw. (x_2, y_2) schrumpfen, so ergibt (4.51):

$$\begin{aligned} & s(v, \phi, \psi, \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2, \frac{1}{2}y_1 + \frac{1}{2}y_2) \\ & \cong \frac{1}{2} s(v, \phi, \psi, x_1, y_1) + \frac{1}{2} s(v, \phi, \psi, x_2, y_2) \quad . \end{aligned} \quad (4.52)$$

Mittels Induktion gilt dann für alle dyadischen rationalen Zahlen $\alpha \in [0, 1]$:

$$\begin{aligned} & s(v, \phi, \psi, \alpha x_1 + (1-\alpha)x_2, \alpha y_1 + (1-\alpha)y_2) \\ & \cong \alpha s(v, \phi, \psi, x_1, y_1) + (1-\alpha) s(v, \phi, \psi, x_2, y_2) \quad . \end{aligned} \quad (4.53)$$

Da $s(v, \Phi, \Psi, x, y)$ in (x, y) halbstetig von oben ist, gilt (4.53) für alle reellen $\alpha \in [0, 1]$ ([27]).

Q.E.D.

Satz 4.15:

- a) Die Menge $M(v, \Phi, \Psi) := \{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 : s(v, \Phi, \Psi, x, y) > -\infty \}$ ist konvex und beschränkt.
- b) Die Funktion $s(v, \Phi, \Psi, x, y)$ ist stetig in (x, y) auf $\text{int } M(v, \Phi, \Psi)$.

Beweis:

a) Zunächst zeigen wir die Konvexität von $M(v, \Phi, \Psi)$. Seien $s(v, \Phi, \Psi, x_i, y_i) > -\infty$, $i=1, 2$. Dann folgt aus der Konkavität von $s(v, \Phi, \Psi, x, y)$ in (x, y) :

$$\begin{aligned} & s(v, \Phi, \Psi, \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2, \frac{1}{2}y_1 + \frac{1}{2}y_2) \\ & \geq \frac{1}{2} s(v, \Phi, \Psi, x_1, y_1) + \frac{1}{2} s(v, \Phi, \Psi, x_2, y_2) \end{aligned} \quad , \quad (4.54)$$

d.h. $M(v, \Phi, \Psi)$ ist konvex.

Mit (2.15) ist für alle $r \in \mathbb{N}^V$

$$\left\| \frac{1}{n(r)} P(n(r), \wedge_v(r)) U_\Phi(\wedge_v(r)) \right\| \leq \frac{n(\wedge_v(r))}{n(r)} \|\Phi\| \quad . \quad (4.55)$$

Wegen

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{n(\wedge_v(r))}{n(r)} = v \quad (4.56)$$

existiert ein $C \in \mathbb{R}$, so daß für alle $r \in \mathbb{N}^V$ gilt:

$$\left\| \frac{1}{n(r)} P(n(r), \Lambda_v(r)) U_\phi(\Lambda_v(r)) \right\| \leq C. \quad (4.57)$$

Damit gilt für alle offene konvexe $J \subset \mathbb{R}^2$ mit $J \cap [-C, C] \times \mathbb{R} = \emptyset$ und alle $r \in \mathbb{N}^V$:

$$\Omega(\Lambda_v(r), n(r), \phi, \psi, J) = 0. \quad (4.58)$$

Die analoge Aussage gilt auch für $\frac{1}{n(r)} P(n(r), \Lambda_v(r)) U_\psi(\Lambda_v(r))$, womit die Beschränktheit gezeigt ist.

b) Die Stetigkeit folgt unmittelbar aus Lemma A.2 in Verbindung mit den Sätzen 4.14 und 4.15.a.

Q.E.D.

Als nächstes möchten wir die Menge $M(v, \phi, \psi)$ näher bestimmen. Leider können wir nur ihren Abschluß angeben. Dazu definieren wir für jedes $r \in \mathbb{N}^V$:

$$M(v, \phi, \psi, r) := \left\{ (\lambda, \alpha) : \lambda \in \sigma\left(\frac{1}{n(r)} U_\phi(\Lambda_v(r))\right), \right.$$

$$\left. \alpha \in \sigma\left(\frac{1}{n(r)} U_\psi(\Lambda_v(r))\right), \right.$$

$$\left. \text{Tr}_H(\Lambda_v(r)) P(n(r), \Lambda_v(r)) P(\lambda) P(\alpha) \neq 0 \right\}. \quad (4.59)$$

Satz 4.16:

$$\overline{M(v, \phi, \psi)} = \bigcup_{r \in \mathbb{N}^V} \overline{M(v, \phi, \psi, r)}. \quad (4.60)$$

Beweis: Sei

$$(x_0, y_0) \notin \overline{\bigcup_{r \in \mathbb{N}^V} M(v, \phi, \psi, r)} \quad (4.61)$$

Dann existiert eine offene konvexe Menge $J \subset \mathbb{R}^2$ mit $(x_0, y_0) \in J$ und

$$J \cap \overline{\bigcup_{r \in \mathbb{N}^V} M(v, \phi, \psi, r)} = \emptyset. \quad (4.62)$$

Damit ist für alle $r \in \mathbb{N}^V$

$$\Omega(\wedge_v(r), n(r), \phi, \psi, J) = 0, \quad (4.63)$$

d.h. $s(v, \phi, \psi, J) = -\infty$. Da

$$s(v, \phi, \psi, J) = \sup \{ s(v, \phi, \psi, x, y) : (x, y) \in J \} \quad (4.64)$$

ist, ist für alle $(x, y) \in J$ $s(v, \phi, \psi, x, y) = -\infty$, d.h.

$$(x_0, y_0) \notin \overline{M(v, \phi, \psi)} \quad (4.65)$$

Also gilt:

$$\overline{M(v, \phi, \psi)} \subset \overline{\bigcup_{r \in \mathbb{N}^V} M(v, \phi, \psi, r)}. \quad (4.66)$$

Sei nun

$$(x_0, y_0) \in \overline{\bigcup_{r \in \mathbb{N}^V} M(v, \phi, \psi, r)} \quad (4.67)$$

und sei $J \subset \mathbb{R}^2$ offen und konvex mit $(x_0, y_0) \in J$. Dann existiert

ein $r_0 \in \mathbb{N}^V$, so daß $M(v, \Phi, \Psi, r_0) \cap J \neq \emptyset$ ist, d.h.

$$\Omega(\Lambda_v(r_0), n(r_0), \Phi, \Psi, J) \neq 0 \quad . \quad (4.68)$$

Damit gilt:

$$\begin{aligned} -\infty &< \frac{1}{n(r_0)} \log \Omega(\Lambda_v(r_0), n(r_0), \Phi, \Psi, J) \\ &\equiv \sup_{r \in \mathbb{N}^V} \frac{1}{n(r)} \log \Omega(\Lambda_v(r), n(r), \Phi, \Psi, J) \\ &= s(v, \Phi, \Psi, J) \quad . \end{aligned} \quad (4.69)$$

Demnach existiert wegen (4.64) für jedes offene konvexe $J \subset \mathbb{R}^2$ mit $(x_0, y_0) \in J$ ein $(x, y) \in J$ mit $(x, y) \in M(v, \Phi, \Psi)$, d.h.

$$(x_0, y_0) \in \overline{M(v, \Phi, \Psi)} \quad . \quad (4.70)$$

Also gilt:

$$\overline{\bigcup_{r \in \mathbb{N}^V} M(v, \Phi, \Psi, r)} \subset \overline{M(v, \Phi, \Psi)} \quad . \quad (4.71)$$

Q.E.D.

Lemma 4.17 [48]:

Seien P und Q orthogonale Projektionsoperatoren eines Hilbert-
raumes $\mathcal{H}$ mit

$$\text{Tr}_{\mathcal{H}} PQ = \text{Tr}_{\mathcal{H}} P = \text{Tr}_{\mathcal{H}} Q < \infty \quad . \quad (4.72)$$

Dann ist $P = Q$.

Satz 4.18:

Sind für ein $a \in \mathbb{N}^V$ $P(n(a), \Lambda(a)) U_\Phi(\Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a)) U_\Psi(\Lambda(a))$
und $P(n(a), \Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren,
dann ist

$$\text{int} \{ (x, y) : s(v, \Phi, \Psi, x, y) > -\infty \} \neq \emptyset . \quad (4.73)$$

Beweis: Da $M(v, \Phi, \Psi)$ konvex ist und da für alle $r \in \mathbb{N}^V$

$$M(v, \Phi, \Psi, r) \subset M(v, \Phi, \Psi) \quad (4.74)$$

ist, genügt es zu zeigen, daß für ein $r_0 \in \mathbb{N}^V$ das Innere der
konvexen Hülle von $M(v, \Phi, \Psi, r_0)$ nicht leer ist, d.h. daß

$$\text{int}(\text{conv } M(v, \Phi, \Psi, r_0)) \neq \emptyset . \quad (4.75)$$

Seien nun für ein $a \in \mathbb{N}^V$ $P(n(a), \Lambda(a)) U_\Phi(\Lambda(a))$,
 $P(n(a), \Lambda(a)) U_\Psi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear
unabhängige Operatoren. Dann sind, wie wir in Lemma 4.19 zeigen
werden, die Operatoren $P(n(a), \Lambda_v(a)) U_\Phi(\Lambda_v(a))$,
 $P(n(a), \Lambda_v(a)) U_\Psi(\Lambda_v(a))$ und $P(n(a), \Lambda_v(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda_v(a))$ linear
unabhängig. Daran anschließend werden wir in Lemma 4.20 beweisen,
daß daraus

$$\text{int}(\text{conv } M(v, \Phi, \Psi, a)) \neq \emptyset \quad (4.76)$$

folgt.

Q.E.D.

Lemma 4.19:

Seien $\Phi, \Psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\Phi = \kappa^\Psi$. Sei $\Lambda_1 \subset \Lambda_2 \subset \mathbb{Z}^V$. Seien $P(n(\Lambda_1), \Lambda_1) U_\Phi(\Lambda_1)$, $P(n(\Lambda_1), \Lambda_1) U_\Psi(\Lambda_1)$ und $P(n(\Lambda_1), \Lambda_1)$ auf $\mathbb{H}(\Lambda_1)$ linear unabhängige Operatoren. Dann sind auch $P(n(\Lambda_1), \Lambda_2) U_\Phi(\Lambda_2)$, $P(n(\Lambda_1), \Lambda_2) U_\Psi(\Lambda_2)$ und $P(n(\Lambda_1), \Lambda_2)$ auf $\mathbb{H}(\Lambda_2)$ linear unabhängig.

Beweis: Angenommen, sie wären linear abhängig. Dann hat die Gleichung

$$aP(n(\Lambda_1), \Lambda_2) U_\Phi(\Lambda_2) + bP(n(\Lambda_1), \Lambda_2) U_\Psi(\Lambda_2) + cP(n(\Lambda_1), \Lambda_2) = 0 \quad (4.77)$$

eine nicht-triviale Lösung $(a', b', c') \neq (0, 0, 0)$. Sei nun

$$\varphi_{\Lambda_2} = \varphi_{\Lambda_1} \otimes_{x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1} \kappa_x^\Phi \in \mathbb{H}(\Lambda_2) \quad (4.78)$$

mit $\varphi_{\Lambda_1} \in \mathbb{H}(\Lambda_1)$. Dann gilt mit (2.25) und (2.24) :

$$U_\Phi(\Lambda_2) \varphi_{\Lambda_2} = (U_\Phi(\Lambda_1) \varphi_{\Lambda_1}) \otimes_{x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1} \kappa_x^\Phi, \quad (4.79)$$

$$U_\Psi(\Lambda_2) \varphi_{\Lambda_2} = (U_\Psi(\Lambda_1) \varphi_{\Lambda_1}) \otimes_{x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1} \kappa_x^\Phi, \quad (4.80)$$

$$P(n(\Lambda_1), \Lambda_2) \varphi_{\Lambda_2} = (P(n(\Lambda_1), \Lambda_1) \varphi_{\Lambda_1}) \otimes_{x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1} \kappa_x^\Phi. \quad (4.81)$$

Damit gilt für alle $\varphi_{\Lambda_1} \in \mathbb{H}(\Lambda_1)$:

$$(a'P(n(\Lambda_1), \Lambda_2)U_\Phi(\Lambda_2) + b'P(n(\Lambda_1), \Lambda_2)U_\Psi(\Lambda_2) + c'P(n(\Lambda_1), \Lambda_2)) \varphi_{\Lambda_2} =$$

$$= (a'P(n(\Lambda_1), \Lambda_1)U_\phi(\Lambda_1) + b'P(n(\Lambda_1), \Lambda_1)U_\psi(\Lambda_1) + c'P(n(\Lambda_1), \Lambda_1))$$

$$x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1 \quad \kappa_x^\phi$$

$$= 0 \quad . \quad (4.82)$$

Daraus folgt jedoch, daß im Widerspruch zur Voraussetzung $P(n(\Lambda_1), \Lambda_1)U_\phi(\Lambda_1)$, $P(n(\Lambda_1), \Lambda_1)U_\psi(\Lambda_1)$ und $P(n(\Lambda_1), \Lambda_1)$ auf $\mathbb{H}(\Lambda_1)$ linear abhängig sind.

Q.E.D.

Lemma 4.20:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ und sei $0 \leq n \leq n(\Lambda)$. Seien $P(n, \Lambda)U_\phi(\Lambda)$, $P(n, \Lambda)U_\psi(\Lambda)$ und $P(n, \Lambda)$ auf $\mathbb{H}(\Lambda)$ linear unabhängige Operatoren. Sei

$$M := \{ (\lambda_i^\wedge, \alpha_j^\wedge) : \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) P(\lambda_i^\wedge) P(\alpha_j^\wedge) \neq 0 \} \quad . \quad (4.83)$$

Dann ist

$$\text{int}(\text{conv } M) \neq \emptyset \quad . \quad (4.84)$$

Beweis: Angenommen, das Innere wäre leer. Dann ist $\text{conv } M$ eine Strecke in $\mathbb{R}^2$, d.h. es existieren Konstanten $a, b, c \in \mathbb{R}$ mit $|a| + |b| + |c| \neq 0$, so daß für alle $(x, y) \in M$ gilt:

$$a x + b y + c = 0 \quad (4.85)$$

Der einzige Fall, den wir untersuchen müssen, ist der, daß sowohl a als auch b ungleich Null sind. Denn sonst ist $P(n, \wedge) U_{\phi}(\wedge)$ bzw. $P(n, \wedge) U_{\psi}(\wedge)$ ein Vielfaches von $P(n, \wedge)$, womit dann $P(n, \wedge) U_{\phi}(\wedge)$, $P(n, \wedge) U_{\psi}(\wedge)$ und $P(n, \wedge)$ linear abhängig sind.

Wir können also annehmen, daß $\text{conv } M$ nicht parallel zur x -Achse bzw. zur y -Achse liegt. Demnach existiert zu jedem $\lambda_i^{\wedge} \in \sigma(U_{\phi}(\wedge))$ höchstens ein $\alpha_i^{\wedge} \in \sigma(U_{\psi}(\wedge))$ mit

$$\text{Tr}_{\text{IH}(\wedge)} P(n, \wedge) P(\lambda_i^{\wedge}) P(\alpha_i^{\wedge}) \neq 0 \quad (4.86)$$

und umgekehrt. Ist $(\lambda_i^{\wedge}, \alpha_i^{\wedge}) \in M$, dann gilt:

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_{\text{IH}(\wedge)} P(n, \wedge) P(\lambda_i^{\wedge}) P(\alpha_i^{\wedge}) \\ &= \text{Tr}_{\text{IH}(\wedge)} P(n, \wedge) P(\lambda_i^{\wedge}) P(n, \wedge) P(\alpha_i^{\wedge}) \\ &= \sum_{\alpha_j \in \sigma(U_{\psi}(\wedge))} \text{Tr}_{\text{IH}(\wedge)} P(n, \wedge) P(\lambda_i^{\wedge}) P(\alpha_j^{\wedge}) \\ &= \text{Tr}_{\text{IH}(\wedge)} P(n, \wedge) P(\lambda_i^{\wedge}) . \end{aligned} \quad (4.87)$$

Ebenso ist

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_{\text{IH}(\wedge)} P(n, \wedge) P(\lambda_i^{\wedge}) P(n, \wedge) P(\alpha_i^{\wedge}) \\ &= \sum_{\lambda_k \in \sigma(U_{\phi}(\wedge))} \text{Tr}_{\text{IH}(\wedge)} P(n, \wedge) P(\lambda_k^{\wedge}) P(\alpha_i^{\wedge}) \\ &= \text{Tr}_{\text{IH}(\wedge)} P(n, \wedge) P(\alpha_i^{\wedge}) . \end{aligned} \quad (4.88)$$

Da

$$[P(n, \Lambda), U_\phi(\Lambda)] = [P(n, \Lambda), U_\psi(\Lambda)] = 0 \quad (4.89)$$

ist, sind sowohl $P(n, \Lambda) P(\lambda_i^\wedge)$ als auch $P(n, \Lambda) P(\alpha_i^\wedge)$ orthogonale Projektionsoperatoren. Mit Lemma 4.17 ist dann

$$P(n, \Lambda) P(\lambda_i^\wedge) = P(n, \Lambda) P(\alpha_i^\wedge) . \quad (4.90)$$

Für alle $\lambda_j^\wedge$, für die kein $\alpha_j^\wedge$ mit

$$\text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) P(\lambda_j^\wedge) P(\alpha_j^\wedge) \neq 0 \quad (4.91)$$

existiert, gilt:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha_k^\wedge \in \sigma(U_\psi(\Lambda))} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) P(\lambda_j^\wedge) P(\alpha_k^\wedge) \\ &= \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) P(\lambda_j^\wedge) = 0 , \end{aligned} \quad (4.92)$$

d.h.

$$P(n, \Lambda) P(\lambda_j^\wedge) = 0 . \quad (4.93)$$

Analog gilt für alle $\alpha_1^\wedge$, für die kein $\lambda_1^\wedge$ mit $(\lambda_1^\wedge, \alpha_1^\wedge) \in M$ existiert:

$$P(n, \Lambda) P(\alpha_1^\wedge) = 0 . \quad (4.94)$$

Für alle $(\lambda_i^\wedge, \alpha_i^\wedge) \in M$ ist nun

$$a \lambda_i^\wedge + b \alpha_i^\wedge + c = 0 \quad , \quad (4.95)$$

womit gilt:

$$\begin{aligned} P(n, \wedge) U_\phi(\wedge) &= \sum_{\lambda_k^\wedge \in \sigma(U_\phi(\wedge))} \lambda_k^\wedge P(n, \wedge) P(\lambda_k^\wedge) \\ &= \sum_{\{\lambda_k^\wedge : (\lambda_k^\wedge, \alpha_k^\wedge) \in M\}} \lambda_k^\wedge P(n, \wedge) P(\lambda_k^\wedge) \\ &= \sum_{\{\lambda_k^\wedge : (\lambda_k^\wedge, \alpha_k^\wedge) \in M\}} \left(\frac{b}{a} \alpha_k^\wedge + \frac{c}{a} \right) P(n, \wedge) P(\alpha_k^\wedge) \\ &= \frac{b}{a} P(n, \wedge) U_\psi(\wedge) + \frac{c}{a} P(n, \wedge) \quad . \end{aligned} \quad (4.96)$$

Dies ist jedoch ein Widerspruch zur linearen Unabhängigkeit der Operatoren.

Q.E.D.

Wir untersuchen nun $s(v, \phi, \psi, x, y)$ als Funktion von v . Da sich die Beweise einiger Sätze von den Beweisen der analogen Aussagen in der klassischen statistischen Mechanik nicht unterscheiden, werden wir sie in diesen Fällen nur skizzieren und verweisen auf [27] .

Satz 4.21:

Sei $v_1 > v_2 \geq 1$. Dann ist

$$s(v_1, \phi, \psi, x, y) \geq s(v_2, \phi, \psi, x, y) \quad . \quad (4.97)$$

Beweis: $\wedge_v(r)$ ist für alle $r \in \mathbb{N}^v$ nicht-fallend in v . Mit Lemma 4.2 ist demnach $\Omega(\wedge_v(r), n(r), \phi, \psi, J)$ nicht-fallend in v , also auch $s(v, \phi, \psi, J)$. Damit ist ebenfalls

$$s(v, \phi, \psi, x, y) = \inf \{ s(v, \phi, \psi, J) : J \subset \mathbb{R}^2, (x, y) \in J \} \quad (4.98)$$

nicht-fallend in v .

Q.E.D.

Satz 4.22:

Definieren wir für jedes $(x, y) \in \mathbb{R}^2$

$$v_{\min}(x, y) := \inf \{ v : s(v, \phi, \psi, x, y) > -\infty \}, \quad (4.99)$$

dann ist $s(v, \phi, \psi, x, y)$ in v auf $(v_{\min}(x, y), \infty)$ stetig und konkav.

Beweis: Der Beweis zerfällt in zwei Schritte. Zunächst beweist man folgende Aussage: Ist $v' > \frac{1}{2}v_1 + \frac{1}{2}v_2$, dann gilt:

$$\begin{aligned} & s(v', \phi, \psi, \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2, \frac{1}{2}y_1 + \frac{1}{2}y_2) \\ & \equiv \frac{1}{2} s(v_1, \phi, \psi, x_1, y_1) + \frac{1}{2} s(v_2, \phi, \psi, x_2, y_2) \end{aligned} \quad (4.100)$$

Dann zeigt man, daß

$$\lim_{v' \downarrow v} s(v', \phi, \psi, x, y) \quad (4.101)$$

konkav und daher stetig in v ist (Lemma A.2). Da ferner $s(v, \phi, \psi, x, y)$ nicht-fallend in v ist, folgt

$$s(v, \phi, \psi, x, y) = \lim_{v' \downarrow v} s(v', \phi, \psi, x, y) \quad , \quad (4.102)$$

womit $s(v, \phi, \psi, x, y)$ in v stetig und konkav ist [27] .

Q.E.D.

Über das Verhalten von $s(v, \phi, \psi, x, y)$ an der Stelle $v_{\min}(x, y)$ können wir keine näheren Angaben machen. Mit Satz 4.21 wissen wir lediglich, daß

$$s(v_{\min}(x, y), \phi, \psi, x, y) \leq \lim_{v' \downarrow v_{\min}(x, y)} s(v', \phi, \psi, x, y) \quad (4.103)$$

ist, womit $s(v, \phi, \psi, x, y)$ in v auf $[1, \infty)$ konkav ist.

Als nächstes werden wir zeigen, daß $s(v, \phi, \psi, x, y)$ in (v, x, y) stetig und konkav ist. Dazu definieren wir:

$$E(\phi, \psi) := \{ (v, x, y) \in \mathbb{R}^3 : s(v, \phi, \psi, x, y) > -\infty \} \quad . \quad (4.104)$$

Satz 4.23:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Seien für ein $a \in \mathbb{N}^\vee$ $P(n(a), \wedge(a))$, $P(n(a), \wedge(a))_{U_\phi(\wedge(a))}$ und $P(n(a), \wedge(a))_{U_\psi(\wedge(a))}$ auf $\mathbb{H}(\wedge(a))$ linear unabhängige Operatoren. Dann gilt:

- a) Das Innere von $E(\phi, \psi)$ ist nicht-leer, konvex und liegt dicht in $E(\phi, \psi)$.
- b) $s(v, \phi, \psi, x, y)$ ist in (v, x, y) auf $\text{int } E(\phi, \psi)$ stetig und konkav.

Beweis:

a) Sei $(v, x, y) \in E(\phi, \psi)$ und sei $v' > v$. Dann ist nach Satz 4.21 auch $(v', x, y) \in E(\phi, \psi)$. Nach Satz 4.18 hat für ein festes v

die Menge

$$\{(x,y) : (v,x,y) \in E(\Phi,\Psi)\} = \{(x,y) : s(v,\Phi,\Psi,x,y) > -\infty\} \quad (4.105)$$

ein nicht-leeres Inneres. Damit hat auch $E(\Phi,\Psi)$ ein nicht-leeres Inneres.

Die beiden anderen Aussagen beweist man mit Hilfe der Ungleichung (4.100) [27] .

b) Ist $(\frac{1}{2}v_1 + \frac{1}{2}v_2, \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2, \frac{1}{2}y_1 + \frac{1}{2}y_2) \in \text{int } E(\Phi,\Psi)$, so ist nach Satz 4.22 $s(v,\Phi,\Psi, \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2, \frac{1}{2}y_1 + \frac{1}{2}y_2)$ stetig in v an der Stelle $\frac{1}{2}v_1 + \frac{1}{2}v_2$. Mit (4.100) folgt dann:

$$\begin{aligned} & s(\frac{1}{2}v_1 + \frac{1}{2}v_2, \Phi, \Psi, \frac{1}{2}x_1 + \frac{1}{2}x_2, \frac{1}{2}y_1 + \frac{1}{2}y_2) \\ & \cong \frac{1}{2} s(v_1, \Phi, \Psi, x_1, y_1) + \frac{1}{2} s(v_2, \Phi, \Psi, x_2, y_2) \quad . \end{aligned} \quad (4.106)$$

Nach Lemma A.4 ist eine lokal-beschränkte, semi-konkave Funktion auf einer offenen konvexen Teilmenge eines euklidischen Raumes stetig und somit auch konkav. Eine obere Schranke ist durch Satz 4.14 gegeben. Eine lokale untere Schranke erhalten wir aus der Stetigkeit von $s(v,\Phi,\Psi,x,y)$ in (x,y) in Verbindung mit Satz 4.21 [27] .

Q.E.D.

Lemma 4.24:

Seien $\Phi, \Psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\Phi = \kappa^\Psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a))_{U_\Phi(\Lambda(a))}$ und $P(n(a), \Lambda(a))_{U_\Psi(\Lambda(a))}$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei entweder

(i) $(v \times J) \cap \text{int } E(\Phi,\Psi) \neq \emptyset$ oder

(ii) sei der Abstand von $v \times J$ zu $E(\phi, \psi)$ größer als Null.

Dann gilt:

$$s(v, \phi, \psi, J) = \sup \{ s(v', \phi, \psi, J_0) : v' < v, J_0 \text{ beschränkt, } \overline{J_0} \subset J \}. \quad (4.107)$$

Beweis:

a) Sei $(v \times J) \cap \text{int } E(\phi, \psi) \neq \emptyset$. Dann ist $s(v, \phi, \psi, J) > -\infty$. Da

$$s(v, \phi, \psi, J) = \sup_{(x, y) \in J} s(v, \phi, \psi, x, y) \quad (4.108)$$

ist und da $s(v, \phi, \psi, x, y)$ in (v, x, y) auf $\text{int } E(\phi, \psi)$ stetig ist, gilt das Lemma für

$$(v \times J) \subset \text{int } E(\phi, \psi) \quad . \quad (4.109)$$

Wir sind fertig, wenn wir zeigen, daß gilt:

$$s(v, \phi, \psi, J) = \sup \{ s(v, \phi, \psi, x, y) : (x, y) \in J \cap M(v, \phi, \psi) \} \quad . \quad (4.110)$$

Nun liegt $J \cap \text{int } M(v, \phi, \psi)$ dicht in $J \cap M(v, \phi, \psi)$, und das Supremum einer konkaven Funktion auf einer konvexen offenen Menge, auf welcher die Funktion nur endliche Werte annehmen kann, ist gleich dem Supremum auf dem Abschluß dieser Menge. Damit ist (4.107) bewiesen.

b) Ist der Abstand von $v \times J$ zu $E(\phi, \psi)$ größer als Null, dann ist $s(v, \phi, \psi, J) = -\infty$. Mit Satz 4.21 und mit Lemma 4.11 ist auch für alle $v' < v$ und alle beschränkten, offenen konvexen $J_0 \subset \mathbb{R}^2$

mit $\overline{J_0} \subset J$ $s(v', \phi, \Psi, J_0) = -\infty$.

Q.E.D.

Die Bedingung (i) bzw. (ii) in Lemma 4.24 benötigen wir, da wir, wie schon bemerkt, nichts Genaues über $s(v, \phi, \Psi, x, y)$ an der Stelle $v_{\min}(x, y)$ aussagen können.

4.4 DER THERMODYNAMISCHE LIMES FÜR FOLGEN, DIE IM SINNE VON LANFORD UNENDLICH GROSS WERDEN

Mit Hilfe der im letzten Paragraphen bewiesenen Eigenschaften von $s(v, \phi, \Psi, x, y)$, speziell mit Lemma 4.24 , sind wir in der Lage, den thermodynamischen Limes für Folgen zu betrachten, die im Sinne von Lanford unendlich groß werden. Für die erste Teilaussage benötigen wir allerdings nur den van-Hove-Begriff des "unendlich groß Werdens".

Lemma 4.25:

Seien $\phi, \Psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\Psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a)) U_\phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a)) U_\Psi(\Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\Lambda_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\Lambda_k)}{n_k} = v > 1 . \quad (4.111)$$

Sei $J \subset \mathbb{R}^2$ eine offene konvexe Menge derart, daß entweder

(i) $(v \times J) \cap \text{int } E(\phi, \Psi) \neq \emptyset$ oder

(ii) der Abstand von $v \times J$ zu $E(\Phi, \Psi)$ größer als Null ist.

Dann gilt:

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\Lambda_k, n_k, \Phi, \Psi, J) \geq s(v, \Phi, \Psi, J) . \quad (4.112)$$

Beweis: Mit Lemma 4.24 genügt es, wenn wir folgende Aussage beweisen: Ist $1 \leq v' < v$ und ist $J_0 \subset \mathbb{R}^2$ beschränkt, offen und konvex mit $\overline{J_0} \subset J$, dann gilt:

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\Lambda_k, n_k, \Phi, \Psi, J) \geq s(v', \Phi, \Psi, J_0) . \quad (4.113)$$

Sei

$$\Delta := \{ (x_1, \dots, x_v) \in \mathbb{Z}^v : 0 \leq x_i \leq r_i v^{1/v}, i=1, \dots, v \} . \quad (4.114)$$

Sei m_k die größte Anzahl nicht-überlappender Translierten von

Δ , die in Λ_k plaziert werden können.

Plazieren wir nun in jede Translierte von Δ eine Translierte von $\Lambda_v, (r)$, so können wir in Λ_k m_k Translierte von $\Lambda_v, (r)$ derart unterbringen, daß der Abstand zwischen zweien dieser Translierten immer größer als R , dem Maximum der Reichweiten von Φ und Ψ , ist. Nach Lemma 3.3 gilt dann:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{m_k n(\Delta)}{n(\Lambda_k)} = 1 . \quad (4.115)$$

Nun ist

$$n(\Delta) < v n(r) , \quad (4.116)$$

und mit (4.111) folgt, dann:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{m_k n(r)}{n_k} > 1 . \quad (4.117)$$

Schreiben wir nun

$$n_k = p_k n(r) + q_k \quad (4.118)$$

mit $0 \leq q_k < n(r)$, so folgt aus (4.117) für hinreichend großes k :

$$m_k > p_k + q_k . \quad (4.119)$$

Für solche hinreichend große k wählen wir in Λ_k $p_k + q_k$ Translierte von $\Lambda_{v,}(r)$. In p_k dieser Translierten betrachten wir je $n(r)$ "Teilchen", in den übrigen q_k Translierten betrachten wir je ein "Teilchen".

Seien $J_0, J \subset \mathbb{R}^2$ offen und konvex, wobei J_0 beschränkt sei mit $\overline{J_0} \subset J$. Dann gilt mit den Lemmata 4.2 und 4.3 für jedes offene konvexe $J' \subset \mathbb{R}^2$ und jedes $k \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} & \Omega(\Lambda_k, n_k, \phi, \psi, \frac{p_k n(r)}{n_k} J_0 + \frac{q_k}{n_k} J') \\ & \cong (\Omega(\Lambda_{v,}(r), n(r), \phi, \psi, J_0))^{p_k} (\Omega(\Lambda_{v,}(r), 1, \phi, \psi, J'))^{q_k} . \end{aligned} \quad (4.120)$$

Ist J' beschränkt, dann ist für hinreichend große k

$$\frac{p_k n(r)}{n_k} J_0 + \frac{q_k}{n_k} J' \subset J . \quad (4.121)$$

Wir wählen nun ein beschränktes J' derart, daß

$$\Omega(\Lambda_v, (r), 1, \phi, \psi, J') \neq 0 \quad (4.122)$$

ist. Dann gilt für hinreichend große k :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{n_k} \log \Omega(\Lambda_k, n_k, \phi, \psi, J) \\ & \equiv \frac{p_k n(r)}{n_k} \frac{1}{n(r)} \log \Omega(\Lambda_v, (r), n(r), \phi, \psi, J_0) \\ & \quad + \frac{q_k}{n_k} \log \Omega(\Lambda_v, (r), 1, \phi, \psi, J') \end{aligned} \quad (4.123)$$

Mit den Limites

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{p_k n(r)}{n_k} = 1, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{q_k}{n_k} = 0 \quad (4.124)$$

erhalten wir schließlich:

$$\begin{aligned} & \liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\Lambda_k, n_k, \phi, \psi, J) \\ & \equiv \frac{1}{n(r)} \log \Omega(\Lambda_v, (r), n(r), \phi, \psi, J_0) \end{aligned} \quad (4.125)$$

Da $r \in \mathbb{N}^v$ beliebig war, gilt somit:

$$\begin{aligned} & \liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\Lambda_k, n_k, \phi, \psi, J) \\ & \equiv \sup_{r \in \mathbb{N}^v} \frac{1}{n(r)} \log \Omega(\Lambda_v, (r), n(r), \phi, \psi, J_0) \\ & = s(v', \phi, \psi, J_0) \end{aligned} \quad (4.126)$$

Q.E.D

Satz 4.26:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \wedge(a))$, $P(n(a), \wedge(a)) U_\phi(\wedge(a))$ und $P(n(a), \wedge(a)) U_\psi(\wedge(a))$ auf $\mathcal{H}(\wedge(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\wedge_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\wedge_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\wedge_k)}{n_k} = v > 1. \quad (4.127)$$

Sei $J \subset \mathbb{R}^2$ eine offene konvexe Menge derart, daß entweder

- (i) $(v \times J) \cap \text{int } E(\phi, \psi) \neq \emptyset$ oder
- (ii) der Abstand von $v \times J$ zu $E(\phi, \psi)$ größer als Null ist.

Dann gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, J) = s(v, \phi, \psi, J). \quad (4.128)$$

Beweis: Mit Lemma 4.25 wissen wir, daß

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, J) \geq s(v, \phi, \psi, J) \quad (4.129)$$

ist, so daß wir lediglich

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, J) \leq s(v, \phi, \psi, J) \quad (4.130)$$

zu beweisen haben. Da $\{\wedge_k\}$ im Sinne von Lanford unendlich groß wird, existiert eine Folge $\{\Delta_k\}$ rechtwinkliger Parallelepipede, so daß

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\Delta_k)}{n(\Delta_k)} \neq 0 \quad (4.131)$$

ist. Wir können nun annehmen, daß die Δ_k die Form $\Delta_v(r_k)$ haben. Wählen wir dabei die r_k in geeigneter Weise, so können wir weiter annehmen, daß für alle $k \in \mathbb{N}$

$$\frac{n(\Delta_k)}{n(\Delta_k)} \leq \frac{1}{2} \quad (4.132)$$

ist, und daß der Limes

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\Delta_k)}{n(\Delta_k)} = a \quad (4.133)$$

mit $0 < a \leq \frac{1}{2}$ existiert.

Sei Δ'_k die Menge aller Punkte von Δ_k , die von Δ_k einen Abstand größer als R haben, $k \in \mathbb{N}$. Aus dieser Definition folgt unmittelbar, daß die Folge $\{\Delta'_k\}$ im Sinne von van Hove unendlich groß wird. Definieren wir

$$n'_k := n(r_k) - n_k, \quad (4.134)$$

so gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n'_k}{n(r_k)} = 1 - \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n_k}{n(r_k)} = 1 - a. \quad (4.135)$$

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\Delta'_k)}{n_k} &= \lim_{k \rightarrow \infty} \left(\frac{n(\Delta'_k)}{n(\Delta_k)} \cdot \frac{n(\Delta_k)}{n(r_k)} \cdot \frac{n(r_k)}{n_k} \right) = \frac{1}{1-a} \vee (1-a) \\ &= v. \end{aligned} \quad (4.136)$$

Mit den Lemmata 4.2 und 4.3 gilt dann:

$$\begin{aligned} & \Omega(\wedge_v(r_k), n(r_k), \phi, \psi, J) \\ & \equiv \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, J) \Omega(\Delta'_k, n'_k, \phi, \psi, J) . \end{aligned} \quad (4.137)$$

Nimmt man den Logarithmus und dividiert durch $n(r_k)$, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{n(r_k)} \log \Omega(\wedge_v(r_k), n(r_k), \phi, \psi, J) \\ & \equiv \frac{n_k}{n(r_k)} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, J) \\ & \quad + \frac{n'_k}{n(r_k)} \frac{1}{n'_k} \log \Omega(\Delta'_k, n'_k, \phi, \psi, J) . \end{aligned} \quad (4.138)$$

Aus Lemma 4.25 folgt:

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\Delta'_k, n'_k, \phi, \psi, J) \equiv s(v, \phi, \psi, J) . \quad (4.139)$$

Aus

$$\begin{aligned} & \sup_{k \in \mathbb{N}^v} \frac{1}{n(r_k)} \log \Omega(\wedge_v(r_k), n(r_k), \phi, \psi, J) \\ & \equiv \sup_{r \in \mathbb{N}^v} \frac{1}{n(r)} \log \Omega(\wedge_v(r), n(r), \phi, \psi, J) \\ & = s(v, \phi, \psi, J) \end{aligned} \quad (4.140)$$

ergibt sich:

$$s(v, \phi, \psi, J) \cong a \limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, J) + (1-a) s(v, \phi, \psi, J) \quad (4.141)$$

Und aus $a > 0$ erhalten wir schließlich:

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, J) \leq s(v, \phi, \psi, J) \quad (4.142)$$

Q.E.D.

Zum Abschluß dieses Paragraphen fassen wir die bisherigen Ergebnisse in einem Satz zusammen.

Satz 4.27:

Seien $\phi, \psi \in B_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \wedge(a))$, $P(n(a), \wedge(a)) U_\phi(\wedge(a))$ und $P(n(a), \wedge(a)) U_\psi(\wedge(a))$ auf $\mathbb{H}(\wedge(a))$ linear unabhängige Operatoren. Dann existiert eine Funktion

$$s(v, \phi, \psi, x, y) : [1, \infty) \times \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R} \cup \{-\infty\} \quad (4.143)$$

mit den Eigenschaften:

- a) $s(v, \phi, \psi, x, y)$ ist in (x, y) auf $\mathbb{R}^2$ konkav, halbstetig von oben und von oben gleichmäßig beschränkt.
- b) Die Menge $M(v, \phi, \psi) := \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : s(v, \phi, \psi, x, y) > -\infty\}$ ist beschränkt, konvex und hat ein nicht-leeres Inneres.
- c) $s(v, \phi, \psi, x, y)$ ist in (x, y) auf $\text{int } M(v, \phi, \psi)$ stetig.
- d) Die Menge $E(\phi, \psi) := \{(v, x, y) \in \mathbb{R}^3 : s(v, \phi, \psi, x, y) > -\infty\}$ hat ein nicht-leeres Inneres.
- e) $\text{int } E(\phi, \psi)$ ist konvex und liegt dicht in $E(\phi, \psi)$.
- f) $s(v, \phi, \psi, x, y)$ ist in (v, x, y) auf $\text{int } E(\phi, \psi)$ stetig und konkav.

g) Sei $J \subset \mathbb{R}^2$ eine offene konvexe Menge derart, daß entweder

(i) $(v \times J) \cap \text{int } E(\phi, \psi) \neq \emptyset$ oder

(ii) der Abstand von $v \times J$ zu $E(\phi, \psi)$ größer als Null ist.

Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\Lambda_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\Lambda_k)}{n_k} = v > 1. \quad (4.144)$$

Dann existiert der folgende Limes und es gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\Lambda_k, n_k, \phi, \psi, J) = \sup_{(x, y) \in J} s(v, \phi, \psi, x, y). \quad (4.145)$$

4.5 DIE MIKROKANONISCHE ENTROPIE

Wir schieben an dieser Stelle eine kurze Betrachtung über das durch das mikrokanonische Ensemble definierte statistische Analogon der Entropie ein. Es zeigt sich, daß die spezifische mikrokanonische Entropie ein Spezialfall der verallgemeinerten spezifischen mikrokanonischen Entropie ist.

Definition 4.28:

Sei $\phi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ und sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$. Sei $I(x) \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall um $x \in \mathbb{R}$. Sei $1 \leq n \leq n(\Lambda)$. Dann definieren wir die dem mikrokanonischen Ensemble (2.53) entsprechende

a) mikrokanonische Zustandssumme durch

$$\Omega(\Lambda, n, \Phi, I(x)) := \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) \sum_{\substack{\lambda_1^\Lambda \\ \frac{1}{n} \lambda_1^\Lambda \in I(x)}} P(\lambda_1^\Lambda), \quad (4.146)$$

b) mikrokanonische Entropie durch

$$S(\Lambda, n, \Phi, I(x)) := \log \Omega(\Lambda, n, \Phi, I(x)) \quad . \quad (4.147)$$

Da, wie man sich leicht überzeugen kann, für alle $\Phi, \Psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\chi^\Phi = \chi^\Psi$

$$\Omega(\Lambda, n, \Phi, I(x)) = \Omega(\Lambda, n, \Phi, \Psi, I(x) \times \mathbb{R}) \quad (4.148)$$

ist, erhalten wir aus Satz 4.27 unmittelbar die analogen Aussagen für die spezifische mikrokanonische Entropie.

Satz 4.29:

Sei $\Phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a)) U_\Phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Dann existiert eine Funktion

$$s(v, \Phi, x) : [1, \infty) \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} \cup \{-\infty\} \quad (4.149)$$

mit den Eigenschaften:

- a) $s(v, \Phi, x)$ ist in x auf $\mathbb{R}$ konkav, halbstetig von oben und von oben gleichmäßig beschränkt.
- b) Die Menge $\{x \in \mathbb{R} : s(v, \Phi, x) > -\infty\}$ ist beschränkt, konvex und hat ein nicht-leeres Inneres.
- c) $s(v, \Phi, x)$ ist in x auf $\text{int}\{x : s(v, \Phi, x) > -\infty\}$ stetig.

- d) Die Menge $\{(v,x) \in \mathbb{R}^2 : s(v,\phi,x) > -\infty\}$ hat ein nicht-leeres Inneres.
- e) $\text{int}\{(v,x) : s(v,\phi,x) > -\infty\}$ ist konvex und liegt dicht in $\{(v,x) : s(v,\phi,x) > -\infty\}$.
- f) $s(v,\phi,x)$ ist in (v,x) auf $\text{int}\{(v,x) : s(v,\phi,x) > -\infty\}$ stetig und konkav.
- g) Ist $v_1 > v_2 \geq 1$, so ist $s(v_1,\phi,x) \geq s(v_2,\phi,x)$.
- h) Sei $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall derart, daß entweder
- (i) $(v \times I) \cap \text{int}\{(v,x) : s(v,\phi,x) > -\infty\} = \emptyset$ oder
 - (ii) der Abstand von $v \times I$ zu $\{(v,x) : s(v,\phi,x) > -\infty\}$ größer als Null ist.

Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\Lambda_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\Lambda_k)}{n_k} = v > 1. \quad (4.150)$$

Dann existiert der folgende Limes und es gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} S(\Lambda_k, n_k, \phi, I) = \sup_{x \in I} s(v, \phi, x). \quad (4.151)$$

Aus (4.145) und (4.148) folgt nun unmittelbar, daß die spezifische mikrokanonische Entropie ein Spezialfall der verallgemeinerten spezifischen mikrokanonischen Entropie ist.

Satz 4.30:

Sei $\phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$. Dann gilt für alle $\psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa \phi = \kappa \psi$:

$$s(v, \phi, x) = \sup_{y \in \mathbb{R}} s(v, \phi, \psi, x, y) . \quad (4.152)$$

Zum Abschluß dieses Paragraphen weisen wir auf eine thermodynamische Äquivalenz verschiedener mikrokanonischer Ensembles hin.

Satz 4.31 [16] :

Sei $\phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$. Sei $(v, x) \in \text{int} \{ (v, x) : s(v, \phi, x) > -\infty \}$. Sei $\{\wedge_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\wedge_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\wedge_k)}{n_k} = v > 1 . \quad (4.153)$$

Dann existieren die folgenden Limites und sind für alle $\delta > 0$ gleich:

$$\begin{aligned} s(v, \phi, x) &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, (x - \delta, x)) \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, (-\infty, x)) . \end{aligned} \quad (4.154)$$

4.6 DIE WAHRSCHEINLICHKEITSVERTEILUNG IM GRENZFALL EINES UNENDLICH GROSSEN SYSTEMS

In diesem Paragraphen diskutieren wir die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des mikrokanonischen Ensembles $W^{\text{mic}}(\Lambda, n, \Phi, I(x))$ im Grenzfall eines unendlich großen Systems. Um zu exakten Aussagen zu gelangen, lassen wir das Intervall $I(x)$ gegen $\{x\}$ streben, nachdem wir den thermodynamischen Limes betrachtet haben. Zuvor führen wir noch eine Hilfsgröße ein, die wir vor allem für den Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich der drei Gibbsschen Ensembles benötigen. Ihre Bedeutung ergibt sich aus Satz 4.34.

Definition 4.32:

Seien $\Phi, \Psi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ mit $\chi^{\Phi} = \chi^{\Psi}$. Sei $(v, x, y) \in [1, \infty) \times \mathbb{R}^2$. Dann definieren wir:

$$d^{\text{mic}}(\Phi, \Psi, y; v, x) := s(v, \Phi, \Psi, x, y) - s(v, \Phi, x) \quad (4.155)$$

Lemma 4.33:

$d^{\text{mic}}(\Phi, \Psi, y; v, x)$ ist in y auf $\mathbb{R}$ konkav mit

$$\sup_{y \in \mathbb{R}} d^{\text{mic}}(\Phi, \Psi, y; v, x) = 0 \quad (4.156)$$

Beweis: Die Konkavität ist trivial, da $s(v, \Phi, \Psi, x, y)$ in y auf $\mathbb{R}$ konkav ist. Die Gleichung (4.156) folgt unmittelbar aus Satz 4.30.

Q.E.D.

Satz 4.34:

Seien $\phi, \psi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \wedge(a))$, $P(n(a), \wedge(a)) U_\phi(\wedge(a))$ und $P(n(a), \wedge(a)) U_\psi(\wedge(a))$ auf $\mathcal{H}(\wedge(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\wedge_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\wedge_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\wedge_k)}{n_k} = v > 1. \quad (4.157)$$

Sei

$$y_{\min}(v, x) := \inf \{ y : d^{\text{mic}}(\phi, \psi, y; v, x) > -\infty \}, \quad (4.158)$$

$$y_{\max}(v, x) := \sup \{ y : d^{\text{mic}}(\phi, \psi, y; v, x) > -\infty \}. \quad (4.159)$$

Sei $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall derart, daß entweder

- (i) $I \cap (y_{\min}(v, x), y_{\max}(v, x)) \neq \emptyset$ oder
- (ii) der Abstand von I zu $(y_{\min}(v, x), y_{\max}(v, x))$ größer als Null ist.

Sei $\{I_l(x)\}$ eine Folge offener Intervalle $I_l(x) \subset \mathbb{R}$ mit $x \in I_l(x)$ für alle $l \in \mathbb{N}$, die gegen $\{x\}$ konvergiert. Dann gilt:

$$\begin{aligned} & \lim_{l \rightarrow \infty} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \text{Tr}_{\mathcal{H}(\wedge_k)} w^{\text{mic}}(\wedge_k, n_k, \phi, I_l(x)) \sum_{\substack{\alpha_j \in I \\ \wedge_j \in I}} P(\alpha_j^{\wedge_k}) \\ &= \sup_{y \in I} d^{\text{mic}}(\phi, \psi, y; v, x). \end{aligned} \quad (4.160)$$

Beweis: Mit Satz 4.27.g und Gleichung (4.5) gilt für alle $l \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned}
 & \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \operatorname{Tr}_{H(\wedge_k)} W^{\text{mic}}(\wedge_k, n_k, \phi, I_1(x)) \sum_{\frac{1}{n_k} \wedge_k \in I} P(\alpha_j^{\wedge_k}) \\
 &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} (\log \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, I_1(x) \times I) - \log \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, I_1(x) \times \mathbb{R})) \\
 &= s(v, \phi, \psi, I_1(x) \times I) - s(v, \phi, \psi, I_1(x) \times \mathbb{R}) \\
 &= \sup_{y \in I} \sup_{x' \in I_1(x)} s(v, \phi, \psi, x', y) - \sup_{x' \in I_1(x)} s(v, \phi, x'). \quad (4.161)
 \end{aligned}$$

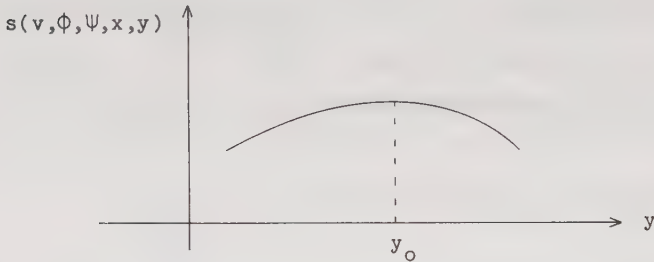
Betrachten wir nun den Limes $l \rightarrow \infty$, so erhalten wir die Behauptung.

Q.E.D.

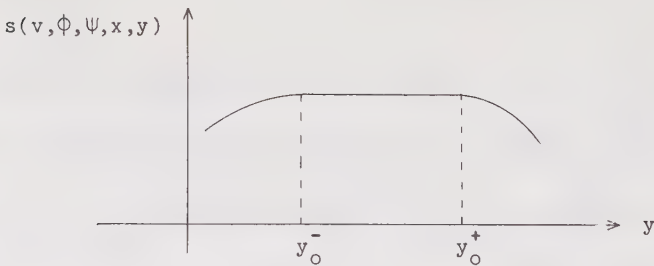
Seien $\{\wedge_k\}$, $\{n_k\}$ und $\{I_1(x)\}$ wie in Satz 4.34. Wir bestimmen nun die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n_k} U_\psi(\wedge_k)$ bezüglich $W^{\text{mic}}(\wedge_k, n_k, \phi, I_1(x))$ im Grenzfall $k \rightarrow \infty$ und $l \rightarrow \infty$. Mittels Satz 4.34 können wir die entsprechende asymptotische Verteilungsfunktion aus der Funktion $y \mapsto d^{\text{mic}}(\phi, \psi, y; v, x)$ ableiten. In Punkten y' mit $d^{\text{mic}}(\phi, \psi, y'; v, x) < 0$ ist die asymptotische Verteilungsfunktion entweder Null oder Eins.

Mit Satz 4.30 können wir die asymptotische Verteilungsfunktion aber auch direkt aus der Funktion $y \mapsto s(v, \phi, \psi, x, y)$ ableiten. Da die Menge $\{y : s(v, \phi, \psi, x, y) > -\infty\}$ beschränkt ist, folgt aus der Halbstetigkeit von oben, daß die Funktion $y \mapsto s(v, \phi, \psi, x, y)$ ihr Supremum über alle $y \in \mathbb{R}$ annimmt. Da $s(v, \phi, \psi, x, y)$ ferner in y konkav ist, gibt es nur zwei Möglichkeiten für das qualitative Verhalten der Funktion $y \mapsto s(v, \phi, \psi, x, y)$:

- a) Entweder nimmt die Funktion $y \mapsto s(v, \phi, \psi, x, y)$ ihr Supremum über alle $y \in \mathbb{R}$ in genau einem Punkt y_0 an, oder



- b) das Supremum wird auf einem Intervall $[y_0^-, y_0^+]$, und nur dort, angenommen.



Sei nun $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall, das entweder die Bedingung (i) oder (ii) von Satz 4.34 erfüllt. Dann verhält sich für ein hinreichend großes l die Wahrscheinlichkeit

$$\text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} W^{\text{mic}}(\wedge_k, n_k, \phi, I_1(x)) \sum_{\substack{\alpha_j^k \in I \\ \frac{1}{n_k} \wedge_k}} P(\alpha_j^k) \quad (4.162)$$

für große $k \in \mathbb{N}$ wie

$$\exp \left\{ n_k \left(\sup_{y \in I} s(v, \phi, \psi, x, y) - \sup_{y \in \mathbb{R}} s(v, \phi, \psi, x, y) \right) \right\} . \quad (4.163)$$

Betrachten wir zunächst den Fall (a) : Sei $\varepsilon > 0$. Dann ist

$$\sup_{y \in (-\infty, y_0 - \varepsilon)} s(v, \phi, \psi, x, y) < s(v, \phi, \psi, x, y_0) . \quad (4.164)$$

Die Wahrscheinlichkeit (4.162) strebt somit für $k \rightarrow \infty$ wie e^{-cn_k} , $c > 0$, gegen Null. Die analoge Aussage gilt auch für das Intervall $(y_0 + \varepsilon, \infty)$. Für jedes $\varepsilon > 0$ strebt also die Gesamtwahrscheinlichkeit aller Eigenwerte von $\frac{1}{n_k} U_{\psi}(\wedge_k)$, die außerhalb des Intervalls $[y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon]$ liegen, für $k \rightarrow \infty$ wie e^{-cn_k} gegen Null. Die entsprechende Verteilungsfunktion strebt damit gegen eine Heaviside-Funktion mit der Sprungstelle y_0 .

Stellen wir im Fall (b) die analogen Betrachtungen an, so können wir lediglich feststellen, daß für ein beliebiges $\varepsilon > 0$ die Gesamtwahrscheinlichkeit aller Eigenwerte, die außerhalb des Intervalls $[y_0^- - \varepsilon, y_0^+ + \varepsilon]$ liegen, für $k \rightarrow \infty$ wie e^{-cn_k} , $c > 0$, gegen Null strebt. Über das Verhalten innerhalb des Intervalls $[y_0^-, y_0^+]$ kann man nichts aussagen. So ist es zum Beispiel möglich, daß sich die Verteilungsfunktion einer Heaviside-Funktion nähert, aber wesentlich langsamer als im Fall (a). Das Verhalten von Fall (b) deutet möglicherweise auf einen Phasenübergang hin.

Für den Fall (a) ist y_0 der thermodynamische Limes des Erwartungswertes der Observablen $\frac{1}{n} U_{\psi}(\wedge)$ bezüglich des mikrokanonischen Ensembles.

Satz 4.35:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \wedge(a))$, $P(n(a), \wedge(a)) U_\phi(\wedge(a))$ und $P(n(a), \wedge(a)) U_\psi(\wedge(a))$ auf $\mathbb{H}(\wedge(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\wedge_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von Z^V , die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\wedge_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\wedge_k)}{n_k} = v_0 > 1. \quad (4.165)$$

Seien x_0 und v_0 derart, daß die Funktion $y \mapsto s(v_0, \phi, \psi, x_0, y)$ ihr Supremum über alle $y \in \mathbb{R}$ in genau einem Punkt $y_0(v_0, x_0)$ annimmt. Sei $\{I_1(x_0)\}$ eine Folge offener Intervalle $I_1(x_0) \subset \mathbb{R}$ mit $x_0 \in I_1(x_0)$ für alle $l \in \mathbb{N}$, die gegen $\{x_0\}$ konvergiert. Dann gilt⁺:

$$\begin{aligned} & \lim_{l \rightarrow \infty} \liminf_{k \rightarrow \infty} \sup \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} W^{\text{mic}}(\wedge_k, n_k, \phi, I_1(x_0)) \frac{1}{n_k} U_\psi(\wedge_k) \\ &= y_0(v_0, x_0). \end{aligned} \quad (4.166)$$

⁺ Sei $f: \mathbb{N}^2 \rightarrow \mathbb{R}$. Dann bezeichnet

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \liminf_{k \rightarrow \infty} f(l, k) = a$$

die Tatsache, daß zu jedem $\varepsilon > 0$ ein L_ε existiert, so daß für alle $l > L_\varepsilon$ gilt:

$$a - \varepsilon \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} f(l, k) \leq \limsup_{k \rightarrow \infty} f(l, k) \leq a + \varepsilon.$$

Beweis: Aus Satz 4.34 folgt, daß zu jedem $\varepsilon > 0$ ein L_ε existiert, so daß für alle $l > L_\varepsilon$ und alle offenen Intervalle $I \subset \mathbb{R}$ mit $I \cap [y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon] = \emptyset$ gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{H(\wedge_k)} w^{\text{mic}}(\wedge_k, n_k, \phi, I_1(x_0)) \sum_{\frac{1}{n_k} \wedge_k \in I} P(\alpha_j^{\wedge_k}) = 0 \quad (4.167)$$

Also ist

$$\begin{aligned} & \lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{H(\wedge_k)} w^{\text{mic}}(\wedge_k, n_k, \phi, I_1(x_0)) \sum_{\frac{1}{n_k} \wedge_k \in (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon)} P(\alpha_j^{\wedge_k}) \\ &= 1 \quad (4.168) \end{aligned}$$

Nach Satz 4.15 existiert ein $C \in \mathbb{R}$, so daß für alle $k \in \mathbb{N}$

$$\|P(n_k, \wedge_k) \frac{1}{n_k} U_\psi(\wedge_k)\| \leq C \quad (4.169)$$

ist. Damit gilt für jedes $k \in \mathbb{N}$:

$$(y_0 - \varepsilon) \text{Tr}_{H(\wedge_k)} w^{\text{mic}}(\wedge_k, n_k, \phi, I_1(x_0)) \sum_{\frac{1}{n_k} \wedge_k \in (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon)} P(\alpha_j^{\wedge_k})$$

$$- C \text{Tr}_{H(\wedge_k)} w^{\text{mic}}(\wedge_k, n_k, \phi, I_1(x_0)) \sum_{\frac{1}{n_k} \wedge_k \notin (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon)} P(\alpha_j^{\wedge_k})$$

$$\equiv \text{Tr}_{H(\wedge_k)} w^{\text{mic}}(\wedge_k, n_k, \phi, I_1(x_0)) \frac{1}{n_k} U_\psi(\wedge_k)$$

$$\begin{aligned} &\leq (y_0 + \varepsilon) \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} w^{\text{mic}}(\Lambda_k, n_k, \Phi, I_1(x_0)) \sum_{\frac{1}{n_k} \alpha_j^{\Lambda_k} \in (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon)} P(\alpha_j^{\Lambda_k}) \\ &+ C \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} w^{\text{mic}}(\Lambda_k, n_k, \Phi, I_1(x_0)) \sum_{\frac{1}{n_k} \alpha_j^{\Lambda_k} \notin (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon)} P(\alpha_j^{\Lambda_k}) . \quad (4.170) \end{aligned}$$

Betrachten wir nun den Limes $k \rightarrow \infty$, so erhalten wir mit (4.167) und (4.168) :

$$\begin{aligned} (y_0 - \varepsilon) &\leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} w^{\text{mic}}(\Lambda_k, n_k, \Phi, I_1(x_0)) \frac{1}{n_k} U_\Psi(\Lambda_k) \\ &\leq \limsup_{k \rightarrow \infty} \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} w^{\text{mic}}(\Lambda_k, n_k, \Phi, I_1(x_0)) \frac{1}{n_k} U_\Psi(\Lambda_k) \\ &\leq y_0 + \varepsilon . \quad (4.171) \end{aligned}$$

Mit der Fußnote von Seite 78 folgt dann die Behauptung.

Q.E.D.

Fazit: Im Grenzfall eines unendlich großen Systems gibt es für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n} U_\Psi(\Lambda)$ bezüglich des mikrokanonischen Ensembles $w^{\text{mic}}(\Lambda, n, \Phi, I(x))$, wobei wir nach dem thermodynamischen Limes $I(x)$ gegen $\{x\}$ streben lassen, nur die beiden folgenden Möglichkeiten:

- a) Entweder strebt die entsprechende Verteilungsfunktion gegen eine Heaviside-Funktion, oder
- b) die asymptotische Verteilungsfunktion ist außerhalb eines abgeschlossenen Intervalls Null bzw. Eins. Über die Wahrschein-

lichkeitsverteilung innerhalb dieses Intervalls können wir nichts aussagen.

Im Fall (a) ist der thermodynamische Limes des Erwartungswerts von $\frac{1}{n} U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des mikrokanonischen Ensembles $W^{\text{mic}}(\Lambda, n, \phi, I(x))$, wobei wir nach dem thermodynamischen Limes $I(x)$ gegen $\{x\}$ streben lassen, gleich dem Wert, in dem die asymptotische Verteilungsfunktion ihren Sprung hat.

5. DAS KANONISCHE ENSEMBLE

In diesem Kapitel untersuchen wir den thermodynamischen Limes der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des kanonischen Ensembles $W^{\text{can}}(\Lambda, n, \Phi, \beta)$. In Paragraph 5.1 führen wir analog zum mikrokanonischen Ensemble die Größe $Q(\Lambda, n, \Phi, \Psi, \beta, J)$ ein und zeigen die Existenz des thermodynamischen Limes von $\frac{1}{n} \log Q(\Lambda, n, \Phi, \Psi, \beta, J)$. Aus dem asymptotischen Verhalten dieser Größe leiten wir dann in Paragraph 5.3 die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_{\Phi}(\Lambda)$ und von $\frac{1}{n}U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des kanonischen Ensembles im Grenzfall eines unendlich großen Systems ab. Zuvor gehen wir in Paragraph 5.2 kurz auf das durch das kanonische Ensemble definierte statistische Analogon der Helmholtzschen freien Energie ein.

5.1 DIE EXISTENZ DES THERMODYNAMISCHEN LIMES DER WAHRSCHEINLICHKEITSVERTEILUNG EINER SPEZIFISCHEN OBSERVABLEN BEZÜGLICH DES KANONISCHEN ENSEMBLES

Mit dem Beweis der Existenz des thermodynamischen Limes von $\frac{1}{n} \log \Omega(\Lambda, n, \Phi, \Psi, J)$ haben wir das mathematische Hauptproblem dieser Arbeit gelöst. Wir führen nun für das kanonische Ensemble $W^{\text{can}}(\Lambda, n, \Phi, \beta)$ die zu $\Omega(\Lambda, n, \Phi, \Psi, J)$ analoge Größe $Q(\Lambda, n, \Phi, \Psi, \beta, J)$ ein und zeigen die Existenz des thermodynamischen Limes von $\frac{1}{n} \log Q(\Lambda, n, \Phi, \Psi, \beta, J)$ mit Hilfe der Existenz des thermodynamischen Limes von $\frac{1}{n} \log \Omega(\Lambda, n, \Phi, \Psi, J)$. Damit benötigen wir die gleichen Voraussetzungen wie im Falle des mikrokanonischen Ensembles.

Seien $\Phi, \Psi \in B_{\text{vac}}$ mit $\kappa^{\Phi} = \kappa^{\Psi}$. Sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ und sei $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall. Sei $1 \leq n \leq n(\Lambda)$ und sei $\beta \in \mathbb{R}$. Das

kanonische Ensemble

$$w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta) = \frac{P(n, \Lambda) \cdot \exp\{-\beta U_{\phi}(\Lambda)\}}{\text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) \exp\{-\beta U_{\phi}(\Lambda)\}} \quad (5.1)$$

induziert auf dem Spektrum von $\frac{1}{n}U_{\psi}(\Lambda)$ ein Wahrscheinlichkeitsmaß. Die Wahrscheinlichkeit von $\sigma(\frac{1}{n}U_{\psi}(\Lambda)) \cap I$ bezüglich $w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta)$ ist durch

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta) &= \sum_{\frac{1}{n} \alpha_j^{\Lambda} \in I} P(\alpha_j^{\Lambda}) \\ &= \frac{\text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) \sum_{\lambda_i^{\Lambda} \in \sigma(U_{\phi}(\Lambda))} e^{-\beta \lambda_i^{\Lambda}} P(\lambda_i^{\Lambda}) \sum_{\frac{1}{n} \alpha_j^{\Lambda} \in I} P(\alpha_j^{\Lambda})}{\text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) \exp\{-\beta U_{\phi}(\Lambda)\}} \quad (5.2) \end{aligned}$$

gegeben. Um den thermodynamischen Limes dieser Wahrscheinlichkeit zu studieren, führen wir die folgende Größe ein:

Definition 5.1:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^{\phi} = \kappa^{\psi}$. Sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$. Sei $1 \leq n \leq n(\Lambda)$ und sei $\beta \in \mathbb{R}$. Sei $J \subset \mathbb{R}^2$ offen und konvex. Dann definieren wir:

$$\begin{aligned} Q(\Lambda, n, \phi, \psi, \beta, J) &:= \\ &= \sum_{\frac{1}{n}(\lambda_i^{\Lambda}, \alpha_j^{\Lambda}) \in J} e^{-\beta \lambda_i^{\Lambda}} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) P(\lambda_i^{\Lambda}) P(\alpha_j^{\Lambda}) \quad (5.3) \end{aligned}$$

Mit dieser Definition läßt sich die Wahrscheinlichkeit (5.2) auch schreiben:

$$\text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} w^{\text{can}}(\Lambda, n, \Phi, \Psi) \sum_{\frac{1}{n} \alpha_j^{\Lambda} \in I} P(\alpha_j^{\Lambda}) = \frac{Q(\Lambda, n, \Phi, \Psi, \beta, \mathbb{R} \times I)}{Q(\Lambda, n, \Phi, \Psi, \beta, \mathbb{R} \times \mathbb{R})} \quad (5.4)$$

Wir zeigen anschließend, daß der thermodynamische Limes von $\frac{1}{n} \log Q(\Lambda, n, \Phi, \Psi, \beta, J)$ existiert.

Satz 5.2:

Seien $\Phi, \Psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^{\Phi} = \kappa^{\Psi}$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a)) U_{\Phi}(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a)) U_{\Psi}(\Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\Lambda_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\Lambda_k)}{n_k} = v > 1 \quad (5.5)$$

Seien $I_1, I_2 \subset \mathbb{R}$ offene Intervalle derart, daß entweder

- (i) $(v \times I_1 \times I_2) \cap \text{int } E(\Phi, \Psi) \neq \emptyset$ oder
- (ii) der Abstand von $v \times I_1 \times I_2$ zu $E(\Phi, \Psi)$ größer als Null ist.

Dann gilt:

$$\begin{aligned} & \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log Q(\Lambda_k, n_k, \Phi, \Psi, \beta, I_1 \times I_2) \\ &= \sup_{(x, y) \in I_1 \times I_2} (s(v, \Phi, \Psi, x, y) - \beta x) \quad (5.6) \end{aligned}$$

Beweis: Um die Gleichungen zu vereinfachen, führen wir folgende Bezeichnung ein:

$$g(I_1 \times I_2) := \sup_{(x,y) \in I_1 \times I_2} (s(v, \phi, \psi, x, y) - \beta x) . \quad (5.7)$$

Sei $I_1 = (x_1, x_2)$ und sei $\beta \geq 0$. Wir beweisen zunächst die beiden folgenden Ungleichungen:

$$\begin{aligned} & s(v, \phi, \psi, I_1 \times I_2) - \beta x_2 \\ & \equiv \liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log Q(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, \beta, I_1 \times I_2) \\ & \equiv \limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log Q(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, \beta, I_1 \times I_2) \\ & \equiv s(v, \phi, \psi, I_1 \times I_2) - \beta x_1 \end{aligned} \quad (5.8)$$

und

$$\begin{aligned} & g(I_1 \times I_2) - \beta(x_2 - x_1) \\ & \equiv \liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log Q(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, \beta, I_1 \times I_2) \\ & \equiv \limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log Q(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, \beta, I_1 \times I_2) \\ & \equiv g(I_1 \times I_2) + \beta(x_2 - x_1) . \end{aligned} \quad (5.9)$$

Aus der Definition von $Q(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, \beta, I_1 \times I_2)$ folgt mit der Definition von $\Omega(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, I_1 \times I_2)$ unmittelbar die Ungleichungskette

$$\begin{aligned}
 & e^{-\beta n_k x_2} \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, I_1 \times I_2) \\
 & \cong Q(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, \beta, I_1 \times I_2) \\
 & \cong e^{-\beta n_k x_1} \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, I_1 \times I_2) \quad . \quad (5.10)
 \end{aligned}$$

Bildet man von allen Gliedern den Logarithmus, dividiert durch n_k und betrachtet den Limes $k \rightarrow \infty$, so erhalten wir mit

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \Omega(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, I_1 \times I_2) = s(v, \phi, \psi, I_1 \times I_2) \quad (5.11)$$

die Ungleichung (5.8) .

Um (5.9) aus (5.8) herzuleiten, bemerken wir, daß gilt:

$$\begin{aligned}
 s(v, \phi, \psi, I_1 \times I_2) - \beta x_2 &= \sup_{(x, y) \in I_1 \times I_2} (s(v, \phi, \psi, x, y) - \beta x_2) \\
 &= \sup_{(x, y) \in I_1 \times I_2} (s(v, \phi, \psi, x, y) - \beta x - \beta(x_2 - x)) \\
 &\cong \sup_{(x, y) \in I_1 \times I_2} (s(v, \phi, \psi, x, y) - \beta x) - \beta(x_2 - x_1) \\
 &= g(I_1 \times I_2) - \beta(x_2 - x_1) \quad . \quad (5.12)
 \end{aligned}$$

Analog erhalten wir

$$s(v, \phi, \psi, I_1 \times I_2) - \beta x_1 \cong g(I_1 \times I_2) + \beta(x_2 - x_1) \quad , \quad (5.13)$$

womit die Ungleichung (5.9) bewiesen ist.

Aus der Ungleichungskette (5.9) ersehen wir, daß (5.6) für sehr kleine Intervalle (x_1', x_2) annähernd erfüllt ist. Wir überdecken nun ein beliebiges beschränktes offenes Intervall mit endlich vielen gleich großen offenen Intervallen und zeigen, daß im Limes nur ein Intervall einen Beitrag liefert. Da die Länge dieser Intervalle beliebig ist, folgt dann die Behauptung. Zuvor müssen wir jedoch zeigen, daß wir nur beschränkte Intervalle betrachten müssen.

Ist $I_1 \subset \mathbb{R}$ ein unbeschränktes Intervall, so existiert wegen Satz 4.15.a ein beschränktes offenes Intervall $I_1' \subset \mathbb{R}$, so daß gilt:

$$Q(\Lambda, n, \phi, \psi, \beta, I_1 \times I_2) = Q(\Lambda, n, \phi, \psi, \beta, I_1' \times I_2) . \quad (5.14)$$

Sei nun $I_1 \subset \mathbb{R}$ ein beschränktes offenes Intervall und sei $\delta > 0$. Seien $I_1^1, \dots, I_1^l \subset \mathbb{R}$ offene Intervalle, deren Länge kleiner als δ ist, und für die

$$I_1 = \bigcup_{i=1}^l I_1^i \quad (5.15)$$

ist. Dann gilt:

$$\begin{aligned} & \sup \{ Q(\Lambda_k, n_k, \phi, \psi, \beta, I_1^i \times I_2) : i=1, \dots, l \} \\ & \equiv Q(\Lambda_k, n_k, \phi, \psi, \beta, I_1 \times I_2) \\ & \equiv 1 \sup \{ Q(\Lambda_k, n_k, \phi, \psi, \beta, I_1^i \times I_2) : i=1, \dots, l \} . \end{aligned} \quad (5.16)$$

Mit der Ungleichung (5.9) gilt für jedes $i=1, \dots, l$:

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log Q(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, \beta, I_1^i \times I_2) - g(I_1^i \times I_2) \leq \beta \delta. \quad (5.17)$$

$$- \liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log Q(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, \beta, I_1^i \times I_2) + g(I_1^i \times I_2) \leq \beta \delta. \quad (5.18)$$

Da ferner

$$\begin{aligned} & \sup \{ g(I_1^i \times I_2) : i=1, \dots, l \} \\ &= \sup \left\{ \sup_{(x,y) \in I_1^i \times I_2} (s(v, \phi, \psi, x, y) - \beta x) : i=1, \dots, l \right\} \\ &= \sup_{(x,y) \in I_1 \times I_2} (s(v, \phi, \psi, x, y) - \beta x) \\ &= g(I_1 \times I_2) \end{aligned} \quad (5.19)$$

ist, erhalten wir:

$$\begin{aligned} g(I_1 \times I_2) - \beta \delta &\leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log Q(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, \beta, I_1 \times I_2) \\ &\leq \limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log Q(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, \beta, I_1 \times I_2) \\ &\leq g(I_1 \times I_2) + \beta \delta. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Lassen wir nun δ gegen Null streben, so erhalten wir (5.6) .

Für $\beta < 0$ ist die Schlußweise analog zu der für $\beta \geq 0$.

Q.E.D.

5.2 DIE KANONISCHE HELMHOLTZSCHE FREIE ENERGIE

Wir schieben an dieser Stelle eine kurze Betrachtung über das durch das kanonische Ensemble definierte statistische Analogon der Helmholtzschen freien Energie ein.

Definition 5.3:

Sei $\Phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ und sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$. Sei $0 \leq n \leq n(\Lambda)$. Dann definieren wir die dem kanonischen Ensemble (2.54) entsprechende

a) kanonische Zustandssumme für $\beta \in \mathbb{R}$ durch

$$Q(\Lambda, n, \Phi, \beta) := \text{Tr}_{\mathcal{H}(\Lambda)} P(n, \Lambda) \exp\{-\beta U_{\Phi}(\Lambda)\} \quad , \quad (5.21)$$

b) kanonische Helmholtzische freie Energie für $\beta \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ durch

$$F(\Lambda, n, \Phi, \beta) := -\frac{1}{\beta} \log Q(\Lambda, n, \Phi, \beta) \quad . \quad (5.22)$$

Lemma 5.4:

Für alle $\Phi, \Psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^{\Phi} = \kappa^{\Psi}$ gilt:

$$Q(\Lambda, n, \Phi, \beta) = Q(\Lambda, n, \Phi, \Psi, \beta, \mathbb{R} \times \mathbb{R}) \quad . \quad (5.23)$$

Die Behauptung von Lemma 5.4 folgt unmittelbar aus den Definitionen 5.1 und 5.3.a. Mit (5.23) läßt sich die Wahrscheinlichkeit (5.4) auch schreiben:

$$\frac{Q(\Lambda, n, \Phi, \Psi, \beta, \mathbb{R} \times I)}{Q(\Lambda, n, \Phi, \Psi, \beta, \mathbb{R} \times \mathbb{R})} = \frac{Q(\Lambda, n, \Phi, \Psi, \beta, \mathbb{R} \times I)}{Q(\Lambda, n, \Phi, \beta)} \quad . \quad (5.24)$$

Aus Satz 5.2 können wir mittels Lemma 5.4 ableiten, daß der thermodynamische Limes von $\frac{1}{n} F(\Lambda, n, \phi, \beta)$ existiert; dabei erhalten wir eine Relation zwischen der spezifischen kanonischen Helmholtzschen freien Energie und der spezifischen mikrokanonischen Entropie.

Satz 5.5:

a) Sei $\phi \in B_{\text{vac}}$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a)) U_\phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a))$ auf $H(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\Lambda_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\Lambda_k)}{n_k} = v > 1. \quad (5.25)$$

Dann existiert der folgende Limes:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} F(\Lambda_k, n_k, \phi, \beta) =: f(v, \phi, \beta). \quad (5.26)$$

b) Sei $\phi \in B_{\text{vac}}$ und sei $v > 1$. Dann gilt:

$$- \beta f(v, \phi, \beta) = \sup_{x \in \mathbb{R}} (s(v, \phi, x) - \beta x). \quad (5.27)$$

Beweis:

a) Die Existenz des thermodynamischen Limes ist mit (5.23) und Satz 5.2 trivial.

b) Nach Satz 5.2 und mit Satz 4.30 gilt:

$$- \beta f(v, \phi, \beta) = \sup_{(x, y) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}} (s(v, \phi, \psi, x, y) - \beta x)$$

$$\begin{aligned}
 &= \sup_{x \in \mathbb{R}} \left(\sup_{y \in \mathbb{R}} s(v, \phi, \psi, x, y) - \beta x \right) \\
 &= \sup_{x \in \mathbb{R}} (s(v, \phi, x) - \beta x) \quad . \quad (5.28)
 \end{aligned}$$

Q.E.D.

Die Relation (5.27) erlaubt uns, die Eigenschaften der spezifischen kanonischen Helmholtzschen freien Energie $f(v, \phi, \beta)$ hinsichtlich den Variablen v und β zu bestimmen.

Satz 5.6:

Sei $\phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ und sei $\beta \neq 0$. Dann gilt:

- a) $f(v, \phi, \beta)$ ist in $\frac{1}{\beta}$ auf $\mathbb{R}$ konkav.
- b) $f(v, \phi, \beta)$ ist in v auf $(1, \infty)$ konvex.

Beweis: Aus (5.27) folgt für $\beta > 0$ die Relation

$$f(v, \phi, \beta) = \inf_{x \in \mathbb{R}} \left(x - \frac{1}{\beta} s(v, \phi, x) \right) \quad . \quad (5.29)$$

a) $\left(x - \frac{1}{\beta} s(v, \phi, x) \right)$ ist eine affine Funktion in $\frac{1}{\beta}$. Das Infimum einer Familie affiner Funktionen ist konkav.

b) Da $\left(x - \frac{1}{\beta} s(v, \phi, x) \right)$ konvex in (v, x) ist, folgt aus Lemma A.5, daß die Funktion

$$v \mapsto \inf_{x \in \mathbb{R}} \left(x - \frac{1}{\beta} s(v, \phi, x) \right) \quad (5.30)$$

konvex ist.

Für $\beta > 0$ ist die Beweisführung analog.

Q.E.D.

5.3 WAHRSCHEINLICHKEITSVERTEILUNGEN IM GRENZFALL EINES UNENDLICH GROSSEN SYSTEMS

In diesem Paragraphen diskutieren wir die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_\Phi(\Lambda)$ und von $\frac{1}{n}U_\Psi(\Lambda)$ bezüglich des kanonischen Ensembles $w^{\text{can}}(\Lambda, n, \Phi, \beta)$ im Grenzfall eines unendlich großen Systems. Die Grundlage dazu bildet

Satz 5.7:

Seien $\Phi, \Psi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\Phi = \kappa^\Psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a))U_\Phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a))U_\Psi(\Lambda(a))$ auf $\mathcal{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\Lambda_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\Lambda_k)}{n_k} = v > 1. \quad (5.31)$$

Seien $I_1, I_2 \subset \mathbb{R}$ offene Intervalle derart, daß

$$\sup_{(x,y) \in I_1 \times I_2} (s(v, \Phi, \Psi, x, y) - \beta x) < -\beta f(v, \Phi, \beta) \quad (5.32)$$

ist. Dann strebt für $k \rightarrow \infty$

$$\frac{Q(\Lambda_k, n_k, \Phi, \Psi, \beta, I_1 \times I_2)}{Q(\Lambda_k, n_k, \Phi, \beta)} \quad (5.33)$$

wie e^{-cn_k} , $c > 0$, gegen Null.

Beweis: Die Behauptung folgt unmittelbar aus dem asymptotischen Verhalten von $Q(\Lambda_k, n_k, \Phi, \Psi, \beta, I_1 \times I_2)$ (Gleichung (5.6)) und von

$Q(\wedge_k, n_k, \phi, \beta)$ (Gleichung (5.26)) für $k \rightarrow \infty$.

Q.E.D.

Zuerst untersuchen wir den thermodynamischen Limes der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_\phi(\wedge)$ bezüglich $W^{\text{can}}(\wedge, n, \phi, \beta)$. Dazu betrachten wir das asymptotische Verhalten von

$$\frac{Q(\wedge_k, n_k, \phi, \phi, \beta, \mathbb{R} \times I)}{Q(\wedge_k, n_k, \phi, \beta)} \quad (5.34)$$

für $k \rightarrow \infty$, wobei $\{\wedge_k\}$ und $\{n_k\}$ wie in Satz 5.7 sind und $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall ist. Wie man sich leicht überzeugen kann, ist

$$Q(\wedge_k, n_k, \phi, \phi, \beta, \mathbb{R} \times I) = Q(\wedge_k, n_k, \phi, \phi, \beta, I \times \mathbb{R}). \quad (5.35)$$

Nach Satz 5.2 gilt dann mit (4.152) :

$$\begin{aligned} & \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log Q(\wedge_k, n_k, \phi, \phi, \beta, \mathbb{R} \times I) \\ &= \sup_{(x, y) \in I \times \mathbb{R}} (s(v, \phi, \phi, x, y) - \beta x) \\ &= \sup_{x \in I} (s(v, \phi, x) - \beta x). \end{aligned} \quad (5.36)$$

Da nach Satz 5.5.b

$$- \beta f(v, \phi, \beta) = \sup_{x \in \mathbb{R}} (s(v, \phi, x) - \beta x) \quad (5.37)$$

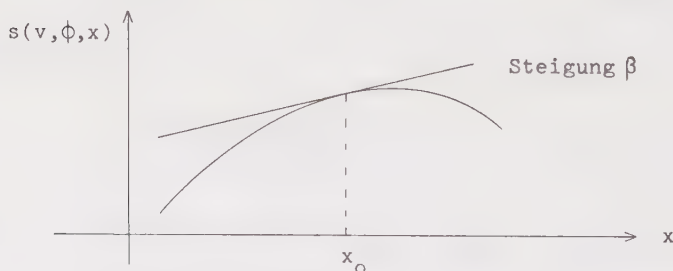
ist, erhalten wir mittels Satz 5.7 aus der Funktion

$$x \mapsto s(v, \phi, x) - \beta x \quad (5.38)$$

das asymptotische Verhalten von (5.34) für $k \rightarrow \infty$.

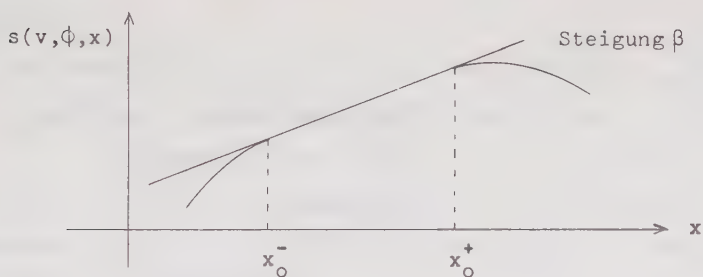
Die Funktion $x \mapsto (s(v, \phi, x) - \beta x)$ ist auf $\mathbb{R}$ konkav und halbstetig von oben. Da die Menge $\{x : s(v, \phi, x) > -\infty\}$ beschränkt ist (Satz 4.29.b), nimmt diese Funktion ihr Supremum über alle $x \in \mathbb{R}$ an. Aus der Konkavität folgt, daß das Supremum in einem Punkt x_0 dann und nur dann angenommen wird, wenn durch den Punkt $(x_0, s(v, \phi, x_0) - \beta x_0)$ eine Stützgerade an den Graphen der Funktion $x \mapsto (s(v, \phi, x) - \beta x)$ mit der Steigung 0 existiert, d.h. dann und nur dann, wenn durch den Punkt $(x_0, s(v, \phi, x_0))$ eine Stützgerade an den Graphen der Funktion $x \mapsto s(v, \phi, x)$ mit der Steigung β existiert. Da $s(v, \phi, x)$ in x auf $\text{int}\{x : s(v, \phi, x) > -\infty\}$ differenzierbar ist⁺, läßt die Konkavität nur zwei Möglichkeiten für das qualitative Verhalten der Funktion $x \mapsto (s(v, \phi, x) - \beta x)$ zu:

- a) Entweder nimmt die Funktion $x \mapsto (s(v, \phi, x) - \beta x)$ ihr Supremum über alle $x \in \mathbb{R}$ in genau einem Punkt x_0 an,



⁺ Siehe dazu Bemerkung 7.1 Seite 133.

- d.h. es existiert genau ein Punkt x_0 , in dem die Ableitung (in den Randpunkten von $\{x : s(v, \phi, x) > -\infty\}$ die links- bzw. rechtsseitige Ableitung) $\frac{d}{dx} s(v, \phi, x)$ den Wert β hat, oder
- b) das Supremum wird auf einem Intervall $[x_0^-, x_0^+]$, und nur dort, angenommen,



d.h. die Menge aller Punkte x_0 , in denen die Ableitung (in den Randpunkten von $\{x : s(v, \phi, x) > -\infty\}$ die links- bzw. rechtsseitige Ableitung) $\frac{d}{dx} s(v, \phi, x)$ den Wert β hat, ist das Intervall $[x_0^-, x_0^+]$.

Betrachten wir zunächst den Fall (a) : Sei $\varepsilon > 0$ und seien $I_1 = (-\infty, x_0 - \varepsilon)$ und $I_2 = (x_0 + \varepsilon, \infty)$. Dann ist für $i=1,2$

$$\sup_{x \in I_i} (s(v, \phi, x) - \beta x) < s(v, \phi, x_0) - \beta x_0. \quad (5.39)$$

Nach Satz 5.7 strebt dann für $k \rightarrow \infty$

$$\frac{Q(\Lambda_k, n_k, \phi, \phi, \beta, I_i \times \mathbb{R})}{Q(\Lambda_k, n_k, \phi, \beta)} \quad (i=1,2) \quad (5.40)$$

wie e^{-cn_k} , $c > 0$, gegen Null. Damit strebt für $k \rightarrow \infty$ die Verteilungsfunktion der Eigenwerte von $\frac{1}{n_k} U_\phi(\Lambda_k)$ bezüglich des

kanonischen Ensembles $w^{\text{can}}(\Lambda_k, n_k, \phi, \beta)$ gegen eine Heaviside-Funktion mit der Sprungstelle x_0 . Die Sprungstelle x_0 der Verteilungsfunktion ist der thermodynamische Limes des Erwartungswertes der Observablen $\frac{1}{n} U_\phi(\Lambda)$ bezüglich des kanonischen Ensembles $w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta)$.

Satz 5.8:

Sei $\phi \in B_{\text{vac}}$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a)) U_\phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a))$ auf $\mathcal{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Seien $\beta_0 \in \mathbb{R}$ und $v_0 > 1$ derart, daß die Funktion $x \mapsto (s(v_0, \phi, x) - \beta_0 x)$ ihr Supremum über alle $x \in \mathbb{R}$ in genau einem Punkt $x_0(v_0, \beta_0)$ annimmt. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\Lambda_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\Lambda_k)}{n_k} = v_0. \quad (5.41)$$

Dann gilt:

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr}_{\mathcal{H}(\Lambda_k)} P(n_k, \Lambda_k) \exp\{-\beta_0 U_\phi(\Lambda_k)\} \frac{1}{n_k} U_\phi(\Lambda_k)}{\text{Tr}_{\mathcal{H}(\Lambda_k)} P(n_k, \Lambda_k) \exp\{-\beta_0 U_\phi(\Lambda_k)\}} \\ = x_0(v_0, \beta_0). \end{aligned} \quad (5.42)$$

Beweis: Sei $I = (x_1, x_2)$. Dann gilt:

$$x_1 Q(\Lambda_k, n_k, \phi, \phi, \beta, I \times \mathbb{R}) \cong$$

$$\begin{aligned} & \equiv \sum_{\frac{1}{n_k} \Lambda_k \in I} e^{-\beta \lambda_i^{\Lambda_k} \frac{\lambda_i^{\Lambda_k}}{n_k}} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} P(n_k, \Lambda_k) P(\lambda_i^{\Lambda_k}) \\ & \equiv x_2 Q(\Lambda_k, n_k, \Phi, \phi, \beta, I \times \mathbb{R}) \quad . \end{aligned} \quad (5.43)$$

Ferner ist

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} P(n_k, \Lambda_k) \exp\{-\beta U_\Phi(\Lambda_k)\} \frac{1}{n_k} U_\Phi(\Lambda_k) \\ & = \sum_{\frac{1}{n_k} \Lambda_k \in I} \sum_{\frac{1}{n_k} \Lambda_k \notin I} e^{-\beta \lambda_i^{\Lambda_k} \frac{\lambda_i^{\Lambda_k}}{n_k}} \cdot \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} P(n_k, \Lambda_k) P(\lambda_i^{\Lambda_k}) \quad . \end{aligned} \quad (5.44)$$

Sei nun $\varepsilon > 0$ und seien $x_1 = x_0 - \varepsilon$ und $x_2 = x_0 + \varepsilon$. Dann ist mit (5.33)

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{Q(\Lambda_k, n_k, \Phi, \phi, \beta_0, I \times \mathbb{R})}{Q(\Lambda_k, n_k, \Phi, \beta_0)} = 1 \quad . \quad (5.45)$$

Lassen wir nun ε gegen Null streben, so folgt aus (5.44) mit (5.33) und (5.45) die Behauptung.

Q.E.D.

Wenden wir uns nun dem Fall (b) zu : Sei $\varepsilon > 0$ und seien

$I_1 = (-\infty, x_0^- - \varepsilon)$ und $I_2 = (x_0^+ + \varepsilon, \infty)$. Dann ist für $i=1,2$

$$\sup_{x \in I_i} (s(v, \phi, x) - \beta x) < \sup_{x \in \mathbb{R}} (s(v, \phi, x) - \beta x) \quad . \quad (5.46)$$

Nach Satz 5.7 strebt dann für $k \rightarrow \infty$

$$\frac{Q(\Lambda_k, n_k, \phi, \beta, I_i \times \mathbb{R})}{Q(\Lambda_k, n_k, \phi, \beta)} \quad (i=1,2) \quad (5.47)$$

wie e^{-cn_k} , $c > 0$, gegen Null. Mit anderen Worten, bezüglich des kanonischen Ensembles $W^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta)$ strebt die Gesamtwahrscheinlichkeit aller Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_\phi(\Lambda)$, die nicht in $[x_0^- - \varepsilon, x_0^+ + \varepsilon]$ liegen, für ein beliebiges $\varepsilon > 0$ mit der Größe des Systems exponentiell gegen Null. Über die Wahrscheinlichkeitsverteilung innerhalb des Intervalls $[x_0^-, x_0^+]$ können wir nichts aussagen.

In Zusammenhang mit Fall (b) können wir noch eine interessante Betrachtung anstellen. Ist β' etwas kleiner als β und entspricht β' genau ein $x_0(v, \beta')$, so ist $x_0(v, \beta') \geq x_0^+(v, \beta)$. Ist β' etwas größer als β und entspricht β' genau ein $x_0(v, \beta')$, so ist $x_0(v, \beta') \leq x_0^-(v, \beta)$. Damit hat die Funktion $\beta' \mapsto x_0(v, \beta')$ an der Stelle β eine Sprungstelle der Größe $x_0^+ - x_0^-$. Interpretieren wir $U_\phi(\Lambda)$ als die Energie des Systems, dann hat das System bei der Temperatur $T = \frac{1}{\beta}$ einen Phasenübergang mit der latenten Wärme pro "Teilchen" von $(x_0^+ - x_0^-)$.

Betrachten wir nun die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_\psi(\Lambda)$ bezüglich des kanonischen Ensembles $W^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta)$ im Grenzfall eines unendlich großen Systems. Dazu führen wir die zu $d^{\text{mic}}(\phi, \psi, y; v, x)$ analoge Größe ein, aus der wir die gesuchte Wahrscheinlichkeitsverteilung ableiten können.

Definition 5.9:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Sei $v \geq 1$ und sei $\beta \in \mathbb{R}$. Dann definieren wir:

$$d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta) := \sup_{x \in \mathbb{R}} (s(v, \phi, \psi, x, y) - \beta x) + \beta f(v, \phi, \beta). \quad (5.48)$$

Lemma 5.10:

$d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta)$ ist in y auf $\mathbb{R}$ konkav mit

$$\sup_{y \in \mathbb{R}} d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta) = 0 \quad (5.49)$$

Beweis: Da $s(v, \phi, \psi, x, y)$ in (x, y) auf $\mathbb{R}^2$ konkav ist, ist nach Lemma A.5

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} (s(v, \phi, \psi, x, y) - \beta x) \quad (5.50)$$

konkav in y . Damit ist auch $d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta)$ konkav in y . Die Gleichung (5.49) folgt unmittelbar aus den Sätzen 4.30 und 5.5.b.

Q.E.D.

Satz 5.11:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^v$ seien $P(n(a), \wedge(a))$, $P(n(a), \wedge(a)) U_\phi(\wedge(a))$ und $P(n(a), \wedge(a)) U_\psi(\wedge(a))$ auf $\mathcal{H}(\wedge(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\wedge_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^v$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\wedge_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\wedge_k)}{n_k} = v > 1 \quad (5.51)$$

Sei

$$y_{\min}(v, \beta) := \inf \{ y : d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta) > -\infty \} \quad (5.52)$$

$$y_{\max}(v, \beta) := \sup \{ y : d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta) > -\infty \} \quad (5.53)$$

Sei $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall derart, daß entweder

- (i) $I \cap (y_{\min}(v, \beta), y_{\max}(v, \beta)) \neq \emptyset$ oder
- (ii) der Abstand von I zu $(y_{\min}(v, \beta), y_{\max}(v, \beta))$ größer als Null ist.

Dann gilt:

$$\begin{aligned} & \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \text{Tr}_{\mathcal{H}(\wedge_k)} w^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta) \sum_{\frac{1}{n_k} \wedge_j^k \in I} P(\alpha_j^k) \\ &= \sup_{y \in I} d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta) . \end{aligned} \quad (5.54)$$

Beweis: Nach Satz 5.2 gilt:

$$\begin{aligned} & \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} \log \text{Tr}_{\mathcal{H}(\wedge_k)} w^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta) \sum_{\frac{1}{n_k} \wedge_j^k \in I} P(\alpha_j^k) \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n_k} (\log Q(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, \beta, \mathbb{R} \times I) - \log Q(\wedge_k, n_k, \phi, \psi, \beta, \mathbb{R} \times \mathbb{R})) \\ &= \sup_{(x, y) \in \mathbb{R} \times I} (s(v, \phi, \psi, x, y) - \beta x) - \sup_{(x, y) \in \mathbb{R}^2} (s(v, \phi, \psi, x, y) - \beta x) \\ &= \sup_{y \in \mathbb{R}} \left(\sup_{x \in \mathbb{R}} (s(v, \phi, \psi, x, y) - \beta x) + \beta f(v, \phi, \beta) \right) . \end{aligned} \quad (5.55)$$

Q.E.D.

Seien $\{\wedge_k\}$ und $\{n_k\}$ wie in Satz 5.11 . Dann können wir mit Satz 5.11 aus der Funktion $y \mapsto d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta)$ die asymptotische Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n_k} U_\psi(\wedge_k)$ bezüglich des kanonischen Ensembles $w^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta)$ für $k \rightarrow \infty$ bestimmen. Da uns eine Aussage über die Halbstetigkeit von

oben fehlt, können wir im allgemeinen nicht feststellen, daß die Funktion $y \mapsto d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta)$ ihr Supremum über alle $y \in \mathbb{R}$ annimmt. Aus der Konkavität folgt jedoch, daß die Menge $\Gamma(v, \beta)$ aller Punkte y_0 mit $d^{\text{can}}(\phi, \psi, y_0; v, \beta) = 0$ konvex ist.

Wir nehmen nun an, daß das Supremum angenommen wird. Sei $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall derart, daß der Abstand von I zu $\Gamma(v, \beta)$ größer als Null ist. Dann strebt für $k \rightarrow \infty$ die Wahrscheinlichkeit

$$\text{Tr}_{H(\Lambda_k)} w^{\text{can}}(\Lambda_k, n_k, \phi, \beta) \sum_{\frac{1}{n_k} \sum_j \alpha_j^k \in I} P(\alpha_j^k) \quad (5.56)$$

wie e^{-cn_k} , $c > 0$, gegen Null.

Wird das Supremum in genau einem Punkt y_0 angenommen, dann strebt also für $k \rightarrow \infty$ die Verteilungsfunktion der Eigenwerte von $\frac{1}{n_k} U_\psi(\Lambda_k)$ gegen eine Heaviside-Funktion mit der Sprungstelle y_0 . Wird das Supremum auf einem Intervall angenommen, so ist die Verteilungsfunktion außerhalb dieses Intervalls Null bzw. Eins. Über die Wahrscheinlichkeitsverteilung innerhalb dieses Intervalls können wir nichts aussagen. Ein solches Verhalten ist möglicherweise ein Hinweis auf einen Phasenübergang.

Wird das Supremum in genau einem Punkt y_0 angenommen, dann ist y_0 der thermodynamische Limes des Erwartungswertes der Observablen $\frac{1}{n} U_\psi(\Lambda)$ bezüglich des kanonischen Ensembles $w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta)$.

Satz 5.12:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \wedge(a))$, $P(n(a), \wedge(a)) U_\phi(\wedge(a))$ und $P(n(a), \wedge(a)) U_\psi(\wedge(a))$ auf $\mathbb{H}(\wedge(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\wedge_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\wedge_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\wedge_k)}{n_k} = v_0 > 1. \quad (5.57)$$

Seien v_0 und β_0 derart, daß die Funktion $y \mapsto d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v_0, \beta_0)$ ihr Supremum über alle $y \in \mathbb{R}$ in genau einem Punkt $y_0(v_0, \beta_0)$ annimmt. Dann gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta_0) \frac{1}{n_k} U_\psi(\wedge_k) = y_0(v_0, \beta_0). \quad (5.58)$$

Beweis: Sei $\varepsilon > 0$. Dann folgt aus Satz 5.11 und Lemma 5.10 :

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta_0) \sum_{\frac{1}{n_k} \alpha_j^{\wedge_k} \in (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon)} P(\alpha_j^{\wedge_k}) \\ = 1. \end{aligned} \quad (5.59)$$

Sei $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall mit $I \cap [y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon] = \emptyset$. Dann gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta_0) \sum_{\frac{1}{n_k} \alpha_j^{\wedge_k} \in I} P(\alpha_j^{\wedge_k}) = 0. \quad (5.60)$$

Nach Satz 4.15 existiert ein $C \in \mathbb{R}$, so daß für alle $k \in \mathbb{N}$

$$\|P(n_k, \wedge_k) \frac{1}{n_k} U_\Psi(\wedge_k)\| \leq C \quad (5.61)$$

ist. Damit gilt für jedes $k \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} & (y_0 - \varepsilon) \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} W^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta_0) \sum_{\frac{1}{n_k} \alpha_j^{\wedge_k} \in (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon)} P(\alpha_j^{\wedge_k}) \\ & - C \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} W^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta_0) \sum_{\frac{1}{n_k} \alpha_j^{\wedge_k} \notin (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon)} P(\alpha_j^{\wedge_k}) \\ & \equiv \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} W^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta_0) \frac{1}{n_k} U_\Psi(\wedge_k) \\ & \equiv (y_0 + \varepsilon) \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} W^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta_0) \sum_{\frac{1}{n_k} \alpha_j^{\wedge_k} \in (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon)} P(\alpha_j^{\wedge_k}) \\ & + C \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} W^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta_0) \sum_{\frac{1}{n_k} \alpha_j^{\wedge_k} \notin (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon)} P(\alpha_j^{\wedge_k}) . \quad (5.62) \end{aligned}$$

Betrachten wir nun den Limes $k \rightarrow \infty$, so erhalten wir mit (5.59) und (5.60):

$$\begin{aligned} y_0 - \varepsilon & \equiv \liminf_{k \rightarrow \infty} \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} W^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta_0) \frac{1}{n_k} U_\Psi(\wedge_k) \\ & \equiv \limsup_{k \rightarrow \infty} \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} W^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta_0) \frac{1}{n_k} U_\Psi(\wedge_k) \end{aligned}$$

$$\leq y_0 + \varepsilon \quad . \quad (5.63)$$

Lassen wir nun ε gegen Null streben, so ergibt sich (5.58) .

Q.E.D.

Zum Abschluß diskutieren wir den Fall, daß die Funktion $y \mapsto d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta)$ ihr Supremum über alle $y \in \mathbb{R}$ nicht annimmt. Da $d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta)$ in y auf $\mathbb{R}$ konkav ist, ist mit Lemma A.2 $d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta)$ in y auf $(y_{\min}(v, \beta), y_{\max}(v, \beta))$ stetig. Damit ist entweder

$$\lim_{\substack{y \rightarrow y_{\min}(v, \beta) \\ y > y_{\min}(v, \beta)}} d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta) = 0 \quad (5.64)$$

oder

$$\lim_{\substack{y \rightarrow y_{\max}(v, \beta) \\ y < y_{\max}(v, \beta)}} d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta) = 0 \quad . \quad (5.65)$$

Seien nun $\{\wedge_k\}$ und $\{n_k\}$ wie in Satz 5.12. Dann ist nach Satz 5.11 für jedes $\varepsilon > 0$ entweder

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{can}}(\wedge_k, n_k, \phi, \beta) \sum_{\substack{\frac{1}{n_k} \wedge_j^k \in (y_{\min}(v, \beta) - \varepsilon, y_{\min}(v, \beta) + \varepsilon)}} P(\alpha_j^k) = 1 \quad (5.66)$$

oder

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} w^{\text{can}}(\Lambda_k, \hat{n}_k, \phi, \beta) \sum_{\frac{1}{n_k} \alpha_j^{\Lambda_k} \in (y_{\max}(v, \beta) - \epsilon, y_{\max}(v, \beta) + \epsilon)} P(\alpha_j^{\Lambda_k}) = 1 \quad (5.67)$$

Analog zum Beweis von Satz 5.12 können wir dann schließen, daß entweder

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} w^{\text{can}}(\Lambda_k, n_k, \phi, \beta) \frac{1}{n_k} U_{\Psi}(\Lambda_k) = y_{\min}(v, \beta) \quad (5.68)$$

oder

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} w^{\text{can}}(\Lambda_k, n_k, \phi, \beta) \frac{1}{n_k} U_{\Psi}(\Lambda_k) = y_{\max}(v, \beta) \quad (5.69)$$

ist.

Fazit: Im Grenzfall eines unendlich großen Systems gibt es für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n} U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des kanonischen Ensembles $w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta)$ nur die beiden folgenden Möglichkeiten:

- a) Entweder strebt die entsprechende Verteilungsfunktion gegen eine Heaviside-Funktion, oder
- b) die asymptotische Verteilungsfunktion ist außerhalb eines abgeschlossenen Intervalls Null bzw. Eins. Über die Wahrscheinlichkeitsverteilung innerhalb dieses Intervalls können wir nichts aussagen.

Im Fall (a) ist der thermodynamische Limes des Erwartungswerts von $\frac{1}{n} U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des kanonischen Ensembles $w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta)$ gleich dem Wert, in dem die asymptotische Verteilungsfunktion ihren Sprung hat.

6. DAS GROSSKANONISCHE ENSEMBLE

In diesem Kapitel untersuchen wir den thermodynamischen Limes der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des großkanonischen Ensembles $w^{\text{mac}}(\Lambda, \Phi, \beta, \mu)$. In Paragraph 6.1 führen wir analog zum kanonischen Ensemble die Größe $Z(\Lambda, \Phi, \Psi, \beta, \mu, J)$ ein und zeigen die Existenz des thermodynamischen Limes von $\frac{1}{n(\Lambda)} \log Z(\Lambda, \Phi, \Psi, \beta, \mu, J)$. Aus dem asymptotischen Verhalten dieser Größe leiten wir dann in Paragraph 6.3 die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_{\Psi}(\Lambda)$ im Grenzfall eines unendlich großen Systems ab. Als Spezialfall diskutieren wir die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwertpaare von $(\frac{1}{n(\Lambda)} N(\Lambda), \frac{1}{n(\Lambda)} U_{\Phi}(\Lambda))$. Zuvor gehen wir in Paragraph 6.2 kurz auf das durch das großkanonische Ensemble definierte statistische Analogon des Druckes ein.

6.1 DIE EXISTENZ DES THERMODYNAMISCHEN LIMES DER WAHRSCHEINLICHKEITSVERTEILUNG EINER SPEZIFISCHEN OBSERVABLEN BEZÜGLICH DES GROSSKANONISCHEN ENSEMBLES

Bisher haben wir die spezifischen Observablen und die spezifischen statistischen Analoga thermodynamischer Potentiale immer auf die Teilchenzahl n bezogen. Im mikrokanonischen und im kanonischen Ensemble ist es sinnvoll, zum Beispiel die Energie pro Teilchen oder die mikrokanonische Entropie pro Teilchen zu betrachten, da in beiden Ensembles die Teilchenzahl fest vorgegeben ist. Im großkanonischen Ensemble haben wir jedoch keine feste Teilchenzahl. Deshalb ist es zweckmäßig, die Observablen und die statistischen Analoga thermodynamischer Potentiale durch die Anzahl

$n(\Lambda)$ der Gitterpunkte zu dividieren, also zum Beispiel die Energie und die mikrokanonische Entropie pro Gitterpunkt zu betrachten. Da in diesem Zusammenhang die Dichte $\rho = \frac{1}{v}$ eine geeignetere Variable als v ist, müssen wir die bisher betrachteten Größen folgendermaßen transformieren:

Definition 6.1:

Sei $\rho \in (0,1]$. Dann definieren wir:

$$a) \quad \hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) = \rho s\left(\frac{1}{\rho}, \phi, \psi, \frac{x}{\rho}, \frac{y}{\rho}\right) . \quad (6.1)$$

$$b) \quad \hat{s}(\rho, \phi, x) = \rho s\left(\frac{1}{\rho}, \phi, \frac{x}{\rho}\right) . \quad (6.2)$$

$$c) \quad \hat{f}(\rho, \phi, \beta) = \rho f\left(\frac{1}{\rho}, \phi, \beta\right) . \quad (6.3)$$

$$d) \quad \hat{E}(\phi, \psi) = \left\{ (\rho, x, y) \in \mathbb{R}^3 : \hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) > -\infty \right\} . \quad (6.4)$$

Wir müssen nun die Eigenschaften der transformierten Größen hinsichtlich der Variablen ρ bestimmen. In allen anderen Argumenten bleiben die Eigenschaften trivialerweise erhalten.

Satz 6.2:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a)) U_\phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a)) U_\psi(\Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Dann gilt:

- a) Das Innere von $\hat{E}(\phi, \psi)$ ist nicht-leer, konvex und liegt dicht in $\hat{E}(\phi, \psi)$.
- b) $\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y)$ ist in (ρ, x, y) auf $\text{int } \hat{E}(\phi, \psi)$ stetig und konkav.

Beweis:

a) Die Beweisführung ist analog zu der von Satz 4.23.a .

b) Wir zeigen nur die Konkavität in ρ . Der Rest geht analog zum Beweis von Satz 4.23.b .

Sei für $i=1,2$

$$s\left(\frac{1}{\rho_i}, \phi, \psi, \frac{x}{\rho_i}, \frac{y}{\rho_i}\right) > -\infty \quad . \quad (6.5)$$

Sei $\alpha \in [0,1]$. Mit den Bezeichnungen

$$\rho = \alpha \rho_1 + (1 - \alpha) \rho_2 \quad , \quad (6.6)$$

$$\beta = \frac{\alpha \rho_1}{\rho} \quad , \quad 1 - \beta = \frac{(1 - \alpha) \rho_2}{\rho} \quad , \quad (6.7)$$

$$(x_i, y_i) = \left(\frac{x}{\rho_i}, \frac{y}{\rho_i}\right) \quad \text{für } i=1,2 \quad (6.8)$$

folgt aus der Konkavität von $s(v, \phi, \psi, x, y)$ in (v, x, y) :

$$\begin{aligned} & \alpha \rho_1 s\left(\frac{1}{\rho_1}, \phi, \psi, x_1, y_1\right) + (1 - \alpha) \rho_2 s\left(\frac{1}{\rho_2}, \phi, \psi, x_2, y_2\right) \\ &= \rho \left(\beta s\left(\frac{1}{\rho_1}, \phi, \psi, x_1, y_1\right) + (1 - \beta) s\left(\frac{1}{\rho_2}, \phi, \psi, x_2, y_2\right) \right) \\ &\leq s\left(\frac{\beta}{\rho_1} + \frac{1-\beta}{\rho_2}, \phi, \psi, \beta x_1 + (1-\beta)x_2, \beta y_1 + (1-\beta)y_2\right) \quad . \quad (6.9) \end{aligned}$$

Aus

$$\frac{\beta}{\rho_1} + \frac{1-\beta}{\rho_2} = \frac{1}{\rho} \quad , \quad (6.10)$$

$$\beta x_1 + (1 - \beta)x_2 = \frac{x}{\rho} \quad , \quad (6.11)$$

$$\beta y_1 + (1-\beta)y_2 = \frac{y}{\rho} \quad (6.12)$$

folgt dann:

$$\begin{aligned} & \alpha \rho_1 s\left(\frac{1}{\rho_1}, \phi, \psi, \frac{x}{\rho_1}, \frac{y}{\rho_1}\right) + (1-\alpha) \rho_2 s\left(\frac{1}{\rho_2}, \phi, \psi, \frac{x}{\rho_2}, \frac{y}{\rho_2}\right) \\ & \equiv \rho s\left(\frac{1}{\rho}, \phi, \psi, \frac{x}{\rho}, \frac{y}{\rho}\right) \end{aligned} \quad (6.13)$$

Q.E.D.

Analog zu diesem Beweis erhalten wir

Satz 6.3:

$\hat{f}(\rho, \phi, \beta)$ ist auf $(0,1)$ konvex in ρ .

Nach diesen Vorbetrachtungen wenden wir uns jetzt dem thermodynamischen Limes der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_\psi(\Lambda)$ bezüglich des großkanonischen Ensembles $w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu)$ zu. Zunächst führen wir für das großkanonische Ensemble die $Q(\Lambda, n, \phi, \psi, \beta, J)$ analoge Größe $Z(\Lambda, \phi, \psi, \beta, \mu, J)$ ein und beweisen die Existenz des thermodynamischen Limes von $\frac{1}{n(\Lambda)} \log Z(\Lambda, \phi, \psi, \beta, \mu, J)$ mit Hilfe der Existenz des thermodynamischen Limes von $\frac{1}{n} \log Q(\Lambda, n, \phi, \psi, \beta, J)$. Damit benötigen wir die gleichen Voraussetzungen wie im Falle des kanonischen Ensembles.

Seien $\phi, \psi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ mit $\chi^\phi = \chi^\psi$. Sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ und seien $\beta, \mu \in \mathbb{R}$. Das großkanonische Ensemble

$$w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu) = \frac{\exp\{\beta \mu N(\Lambda) - \beta U_\phi(\Lambda)\}}{\text{Tr}_{\mathcal{H}(\Lambda)} \exp\{\beta \mu N(\Lambda) - \beta U_\phi(\Lambda)\}} \quad (6.14)$$

induziert auf dem Spektrum von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_{\Psi}(\Lambda)$ ein Wahrscheinlichkeitsmaß. Sei $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall. Dann ist die Wahrscheinlichkeit von $\sigma(\frac{1}{n(\Lambda)} U_{\Psi}(\Lambda)) \cap I$ bezüglich $w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu)$ durch

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{H(\Lambda)} w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu) &= \sum_{\frac{1}{n(\Lambda)} \alpha_j^\wedge \in I} P(\alpha_j^\wedge) \\ &= \frac{\sum_{n=0}^{n(\Lambda)} \sum_{\lambda_1^\wedge \in R} \sum_{\frac{1}{n(\Lambda)} \alpha_j^\wedge \in I} \text{Tr}_{H(\Lambda)} e^{\beta \mu n - \beta \lambda_1^\wedge} P(n, \Lambda) P(\lambda_1^\wedge) P(\alpha_j^\wedge)}{\text{Tr}_{H(\Lambda)} \exp \{ \beta \mu N(\Lambda) - \beta U_{\phi}(\Lambda) \}} \quad (6.15) \end{aligned}$$

gegeben. Um den thermodynamischen Limes dieser Wahrscheinlichkeit zu untersuchen, führen wir folgende Größe ein:

Definition 6.4:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Sei $\Lambda \subset \subset \mathbb{Z}^V$ und seien $\beta, \mu \in \mathbb{R}$. Sei $J \subset \mathbb{R}^3$ offen und konvex. Dann definieren wir:

$$\begin{aligned} Z(\Lambda, \phi, \psi, \beta, \mu, J) &:= \\ &= \sum_{\frac{1}{n(\Lambda)} (n, \lambda_1^\wedge, \alpha_j^\wedge) \in J} e^{\beta \mu n - \beta \lambda_1^\wedge} \text{Tr}_{H(\Lambda)} P(n, \Lambda) P(\lambda_1^\wedge) P(\alpha_j^\wedge). \quad (6.16) \end{aligned}$$

Mit dieser Definition läßt sich die Wahrscheinlichkeit (6.15) auch schreiben:

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda)} w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu) &= \sum_{\frac{1}{n(\Lambda)} \alpha_j^\Lambda \in I} P(\alpha_j^\Lambda) \\ &= \frac{Z(\Lambda, \phi, \psi, \beta, \mu, \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times I)}{Z(\Lambda, \phi, \psi, \beta, \mu, \mathbb{R}^3)} \end{aligned} \quad (6.17)$$

Wir beweisen nun, daß der thermodynamische Limes von

$\frac{1}{n(\Lambda)} \log Z(\Lambda, \phi, \psi, \beta, \mu, J)$ existiert. Dazu benötigen wir

Lemma 6.5:

Sei $I \subset (0,1)$ ein offenes Intervall und sei $J \subset \mathbb{R}^2$ offen und konvex. Dann gilt:

$$Z(\Lambda, \phi, \psi, \beta, \mu, I \times J) = \sum_{\frac{n}{n(\Lambda)} \in I} e^{\beta \mu n} Q(\Lambda, n, \phi, \psi, \beta, \frac{n(\Lambda)}{n} J) \quad (6.18)$$

Beweis: Die Behauptung folgt unmittelbar aus den Definitionen 5.1 und 6.4, wenn man berücksichtigt, daß im Falle des kanonischen Ensembles die Observablen durch die Teilchenzahl n dividiert werden.

Q.E.D.

Satz 6.6:

Seien $\phi, \psi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a)) U_\phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a)) U_\psi(\Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Seien $I_1 \subset (0,1)$, $I_2, I_3 \subset \mathbb{R}$ offene Intervalle derart, daß entweder

(i) $(I_1 \times I_2 \times I_3) \cap \text{int } E(\phi, \psi) \neq \emptyset$ oder

(ii) der Abstand von $I_1 \times I_2 \times I_3$ zu $E(\phi, \psi)$ größer als Null ist.

Dann gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\Lambda_k)} \log Z(\Lambda_k, \phi, \psi, \beta, \mu, I_1 \times I_2 \times I_3) \\ = \sup \left\{ \hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x + \beta \mu \rho : (\rho, x, y) \in I_1 \times I_2 \times I_3 \right\}. \quad (6.19)$$

Beweis: Sei $I_1 = (\rho_1, \rho_2)$. Mit Lemma 6.5 gilt dann für $\beta \mu \geq 0$:

$$e^{\beta \mu \rho_1 n(\Lambda_k)} \sup_{\frac{n}{n(\Lambda_k)} \in I_1} Q(\Lambda_k, n, \phi, \psi, \beta, \frac{n(\Lambda_k)}{n}(I_2 \times I_3)) \\ \leq Z(\Lambda_k, \phi, \psi, \beta, \mu, I_1 \times I_2 \times I_3) \\ \leq e^{\beta \mu \rho_2 n(\Lambda_k)} n(\Lambda_k) \sup_{\frac{n}{n(\Lambda_k)} \in I_1} Q(\Lambda_k, n, \phi, \psi, \beta, \frac{n(\Lambda_k)}{n}(I_2 \times I_3)) \quad (6.20)$$

Logarithmiert man und dividiert durch $n(\Lambda_k)$, so erhält man:

$$\beta \mu \rho_1 + \sup_{\frac{n}{n(\Lambda_k)} \in I_1} \frac{1}{n(\Lambda_k)} \log Q(\Lambda_k, n, \phi, \psi, \beta, \frac{n(\Lambda_k)}{n}(I_2 \times I_3)) \\ \leq \frac{1}{n(\Lambda_k)} \log Z(\Lambda_k, \phi, \psi, \beta, \mu, I_1 \times I_2 \times I_3) \\ \leq \beta \mu \rho_2 + \frac{1}{n(\Lambda_k)} \log n(\Lambda_k) +$$

$$+ \sup_{\frac{n}{n(\Lambda_k)} \in I_1} \frac{1}{n(\Lambda_k)} \log Q(\Lambda_k, n, \Phi, \Psi, \beta, \frac{n(\Lambda_k)}{n}(I_2 \times I_3)) . \quad (6.21)$$

Sei nun $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\Lambda_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n_k}{n(\Lambda_k)} = \rho . \quad (6.22)$$

Dann gilt mit Satz 5.2 und Definition 6.1.a :

$$\begin{aligned} & \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n_k}{n(\Lambda_k)} \frac{1}{n_k} \log Q(\Lambda_k, n_k, \Phi, \Psi, \beta, \frac{n(\Lambda_k)}{n_k}(I_2 \times I_3)) \\ &= \rho \sup_{(x,y) \in \frac{1}{\rho}(I_2 \times I_3)} (s(\frac{1}{\rho}, \Phi, \Psi, x, y) - \beta x) \\ &= \sup_{(x,y) \in I_2 \times I_3} (\rho s(\frac{1}{\rho}, \Phi, \Psi, \frac{x}{\rho}, \frac{y}{\rho}) - \beta x) \\ &= \sup_{(x,y) \in I_2 \times I_3} (\hat{s}(\rho, \Phi, \Psi, x, y) - \beta x) . \end{aligned} \quad (6.23)$$

Betrachten wir in (6.21) den Limes $k \rightarrow \infty$, so ergibt sich:

$$\sup_{\rho \in I_1} \sup_{(x,y) \in I_2 \times I_3} (\hat{s}(\rho, \Phi, \Psi, x, y) - \beta x + \beta \mu \rho_1)$$

$$\cong \liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\Lambda_k)} \log Z(\Lambda_k, \Phi, \Psi, \beta, \mu, I_1 \times I_2 \times I_3)$$

$$\cong \limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\Lambda_k)} \log Z(\Lambda_k, \Phi, \Psi, \beta, \mu, I_1 \times I_2 \times I_3)$$

$$\equiv \sup_{\rho \in I_1} \sup_{(x,y) \in I_2 \times I_3} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x) + \beta \mu \rho_2 \quad . \quad (6.24)$$

Nun ist

$$\begin{aligned} & \sup_{\rho \in I_1} \sup_{(x,y) \in I_2 \times I_3} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x) + \beta \mu \rho_1 \\ &= \sup_{(\rho, x, y) \in I_1 \times I_2 \times I_3} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x) + \beta \mu \rho_1 \\ &= \sup_{(\rho, x, y) \in I_1 \times I_2 \times I_3} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x + \beta \mu \rho + \beta \mu (\rho_1 - \rho)) \\ &\equiv \sup_{(\rho, x, y) \in I_1 \times I_2 \times I_3} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x + \beta \mu \rho) - \beta \mu (\rho_2 - \rho_1) \quad . \quad (6.25) \end{aligned}$$

Führen wir die Bezeichnung

$$\begin{aligned} g(I_1 \times I_2 \times I_3) &:= \\ &= \sup_{(\rho, x, y) \in I_1 \times I_2 \times I_3} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x + \beta \mu \rho) \quad (6.26) \end{aligned}$$

ein, so erhalten wir analog zu (6.25) die Ungleichung

$$\begin{aligned} & \sup_{\rho \in I_1} \sup_{(x,y) \in I_2 \times I_3} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x) + \beta \mu \rho_2 \\ &\equiv g(I_1 \times I_2 \times I_3) + \beta \mu (\rho_2 - \rho_1) \quad . \quad (6.27) \end{aligned}$$

Sei $\delta > 0$. Seien $I_1^1, \dots, I_1^l \subset (0,1)$ offene Intervalle, deren Länge kleiner als δ ist, und für die

$$I_1 = \bigcup_{i=1}^l I_1^i \quad (6.28)$$

ist. Dann gilt:

$$\begin{aligned}
 & \sup \{ Z(\Lambda_k, \Phi, \Psi, \beta, \mu, I_1^i \times I_2 \times I_3) : i=1, \dots, l \} \\
 & \equiv Z(\Lambda_k, \Phi, \Psi, \beta, \mu, I_1 \times I_2 \times I_3) \\
 & \equiv 1 \sup \{ Z(\Lambda_k, \Phi, \Psi, \beta, \mu, I_1^i \times I_2 \times I_3) : i=1, \dots, l \} . \quad (6.29)
 \end{aligned}$$

Mit den Ungleichungen (6.25) und (6.27) gilt für jedes $i=1, \dots, l$:

$$\begin{aligned}
 & \limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\Lambda_k)} \log Z(\Lambda_k, \Phi, \Psi, \beta, \mu, I_1^i \times I_2 \times I_3) - g(I_1^i \times I_2 \times I_3) \\
 & \equiv \beta \mu \delta . \quad (6.30)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\Lambda_k)} \log Z(\Lambda_k, \Phi, \Psi, \beta, \mu, I_1^i \times I_2 \times I_3) - g(I_1^i \times I_2 \times I_3) \\
 & \equiv \beta \mu \delta . \quad (6.31)
 \end{aligned}$$

Da ferner

$$\begin{aligned}
 & \sup \{ g(I_1^i \times I_2 \times I_3) : i=1, \dots, l \} \\
 & = \sup \left\{ \sup_{(\rho, x, y) \in I_1^i \times I_2 \times I_3} (\hat{s}(\rho, \Phi, \Psi, x, y) - \beta x + 3\mu\rho) : i=1, \dots, l \right\} \\
 & = \sup_{(\rho, x, y) \in I_1 \times I_2 \times I_3} (\hat{s}(\rho, \Phi, \Psi, x, y) - \beta x + \beta\mu\rho) \\
 & = g(I_1 \times I_2 \times I_3) \quad (6.32)
 \end{aligned}$$

ist, erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 & g(I_1 \times I_2 \times I_3) - \beta\mu\delta \\
 & \equiv \liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\Lambda_k)} \log Z(\Lambda_k, \phi, \psi, \beta, \mu, I_1 \times I_2 \times I_3) \\
 & \equiv \limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\Lambda_k)} \log Z(\Lambda_k, \phi, \psi, \beta, \mu, I_1 \times I_2 \times I_3) \\
 & \equiv g(I_1 \times I_2 \times I_3) + \beta\mu\delta \quad . \quad (6.33)
 \end{aligned}$$

Lassen wir nun δ gegen Null streben, so erhalten wir (6.19) .

Analog geht der Beweis für $\beta\mu < 0$.

Q.E.D.

6.2 DER GROSSKANONISCHE DRUCK

In diesem Paragraphen diskutieren wir kurz das durch das großkanonische Ensemble definierte statistische Analogon des Drucks.

Definition 6.7:

Sei $\phi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ und sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$. Sei $\mu \in \mathbb{R}$. Dann definieren wir

- a) für $\beta \in \mathbb{R}$ die dem großkanonischen Ensemble (2.55) entsprechende großkanonische Zustandssumme durch

$$Z(\Lambda, \phi, \beta, \mu) := \text{Tr}_{\mathcal{H}(\Lambda)} \exp \{ \beta \mu N(\Lambda) - \beta U_\phi(\Lambda) \} \quad , \quad (6.34)$$

- b) für $\beta \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ den dem großkanonischen Ensemble (2.55) entsprechenden großkanonischen Druck durch

$$p(\Lambda, \phi, \beta, \mu) := \frac{1}{\beta n(\Lambda)} \log Z(\Lambda, \phi, \beta, \mu) \quad . \quad (6.35)$$

Die Eigenschaften von $p(\Lambda, \phi, \beta, \mu)$, insbesondere die Existenz des thermodynamischen Limes, erhalten wir aus Satz 6.8. Dazu führen wir für $\Theta \in \mathbb{B}$ und $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ die Bezeichnung

$$p(\Lambda, \Theta) := \frac{1}{n(\Lambda)} \log \text{Tr}_{H(\Lambda)} \exp\{-U_{\Theta}(\Lambda)\} \quad (6.36)$$

ein.

Satz 6.8 [44]:

- a) Sei $\Theta \in \mathbb{B}$. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von van Hove unendlich groß wird. Dann existiert der Limes

$$\lim_{k \rightarrow \infty} p(\Lambda_k, \Theta) =: p(\Theta) \quad (6.37)$$

und ist endlich.

- b) Seien $\Theta, \Psi \in \mathbb{B}$. Dann ist

$$|p(\Theta) - p(\Psi)| \leq \|\Theta - \Psi\| \quad . \quad (6.38)$$

- c) Die Funktion $p(\cdot)$ ist auf $\mathbb{B}$ konvex.

Sei $\phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ und seien $\beta, \mu \in \mathbb{R}$. Wir definieren für alle $x \in \mathbb{Z}^V$ und alle $\Lambda \subset \subset \mathbb{Z}^V$ mit $n(\Lambda) \neq 1$:

$$\Theta(\{x\}) = -\beta\mu N(\{x\}) + \beta\phi(\{x\}) \quad , \quad (6.39)$$

$$\Theta(\Lambda) = \beta\phi(\Lambda) \quad . \quad (6.40)$$

Da $\mathbb{B}$ ein reeller Banachraum ist, ist $\Theta \in \mathbb{B}$ und für alle gilt:

$$-U_{\Theta}(\Lambda) = \beta\mu N(\Lambda) - \beta U_{\phi}(\Lambda) \quad . \quad (6.41)$$

Damit lassen sich aus Satz 6.8 unmittelbar die Eigenschaften von $p(\Lambda, \phi, \beta, \mu)$ ableiten.

Satz 6.9:

- a) Sei $\phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von van Hove unendlich groß wird. Dann existiert der Limes

$$\lim_{k \rightarrow \infty} p(\Lambda_k, \phi, \beta, \mu) =: p(\phi, \beta, \mu) \quad (6.42)$$

und ist endlich.

- b) Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^{\phi} = \kappa^{\psi}$. Dann ist

$$|p(\phi, \beta, \mu) - p(\psi, \beta, \mu)| \leq \|\phi - \psi\| \quad . \quad (6.43)$$

- c) $\beta p(\phi, \beta, \mu)$ ist in β auf $\mathbb{R}$ konvex.
 d) $\beta p(\phi, \beta, \mu)$ ist in μ auf $\mathbb{R}$ konvex.

Aus Satz 6.6 erhalten wir als Spezialfall eine Relation zwischen dem großkanonischen Druck und der spezifischen kanonischen Helmholtzschen freien Energie bzw. der spezifischen mikrokkanonischen Entropie.

Satz 6.10:

Sei $\Phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$. Dann gilt:

$$\text{a) } \beta p(\Phi, \beta, \mu) = \sup_{(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}} (\hat{s}(\rho, \Phi, x) - \beta x + \beta \mu \rho). \quad (6.44)$$

$$\text{b) } \beta p(\Phi, \beta, \mu) = \sup_{\rho \in (0, 1)} (-\hat{\beta} f(\rho, \Phi, \beta) + \beta \mu \rho) \quad (6.45)$$

6.3 WAHRSCHEINLICHKEITSVERTEILUNGEN IM GRENZFALL EINES UNENDLICH GROSSEN SYSTEMS

In diesem Paragraphen diskutieren wir die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda)} N(\Lambda)$, $\frac{1}{n(\Lambda)} U_{\Phi}(\Lambda)$ und $\frac{1}{n(\Lambda)} U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des großkanonischen Ensembles $W^{\text{mac}}(\Lambda, \Phi, \beta, \mu)$ im Grenzfall eines unendlich großen Systems. Die Grundlage dazu bildet

Satz 6.11:

Seien $\Phi, \Psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^{\Phi} = \kappa^{\Psi}$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a)) U_{\Phi}(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a)) U_{\Psi}(\Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Seien $I_1 \subset (0, 1)$, $I_2, I_3 \subset \mathbb{R}$ offene Intervalle derart, daß

$$\sup_{(\rho, x, y) \in I_1 \times I_2 \times I_3} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x + \beta \mu \rho) < p(\phi, \beta, \mu) \quad (6.46)$$

ist. Dann strebt für $k \rightarrow \infty$

$$\frac{Z(\wedge_k, \phi, \psi, \beta, \mu, I_1 \times I_2 \times I_3)}{Z(\wedge_k, \phi, \beta, \mu)} \quad (6.47)$$

wie $e^{-cn(\wedge_k)}$, $c > 0$, gegen Null.

Beweis: Die Behauptung folgt unmittelbar aus dem asymptotischen Verhalten von $Z(\wedge_k, \phi, \psi, \beta, \mu, I_1 \times I_2 \times I_3)$ und von $Z(\wedge_k, \phi, \beta, \mu)$ für $k \rightarrow \infty$ (Gleichung (6.19) und Gleichung (6.42)).

Q.E.D.

Zuerst betrachten wir die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\wedge)} N(\wedge)$ und von $\frac{1}{n(\wedge)} U_\phi(\wedge)$. Da für alle $\wedge \subset \mathbb{Z}^V$ $U_\phi(\wedge)$ und $N(\wedge)$ kommutieren, interessieren wir uns für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwertpaare von $(\frac{1}{n(\wedge)} N(\wedge), \frac{1}{n(\wedge)} U_\phi(\wedge))$ bezüglich $w^{\text{mac}}(\wedge, \phi, \beta, \mu)$. Seien $I_1 \subset (0, 1)$ und $I_2 \subset \mathbb{R}$ offene Intervalle. Dann ist die Wahrscheinlichkeit von

$$(\sigma(\frac{1}{n(\wedge)} N(\wedge)) \times \sigma(\frac{1}{n(\wedge)} U_\phi(\wedge))) \cap (I_1 \times I_2) \quad (6.48)$$

bezüglich $w^{\text{mac}}(\wedge, \phi, \beta, \mu)$ durch

$$\begin{aligned} & \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge)} w^{\text{mac}}(\wedge, \phi, \beta, \mu) \sum_{\frac{1}{n(\wedge)}(n, \wedge_1) \in I_1 \times I_2} P(n, \wedge) P(\wedge_1) \\ &= \frac{Z(\wedge, \phi, \phi, \beta, \mu, I_1 \times I_2 \times \mathbb{R})}{Z(\wedge, \phi, \beta, \mu)} \end{aligned} \quad (6.49)$$

gegeben. Da

$$\begin{aligned}
 & \sup_{(\rho, x, y) \in I_1 \times I_2 \times \mathbb{R}} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x + \beta \mu \rho) \\
 &= \sup_{(\rho, x) \in I_1 \times I_2} \left(\sup_{y \in \mathbb{R}} \hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x + \beta \mu \rho \right) \\
 &= \sup_{(\rho, x) \in I_1 \times I_2} (\hat{s}(\rho, \phi, x) - \beta x + \beta \mu \rho) \tag{6.50}
 \end{aligned}$$

und

$$\beta p(\phi, \beta, \mu) = \sup_{(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}} (\hat{s}(\rho, \phi, x) - \beta x + \beta \mu \rho) \tag{6.51}$$

ist, erhalten wir mittels Satz 6.11 aus der Funktion

$$(\rho, x) \mapsto (\hat{s}(\rho, \phi, x) - \beta x + \beta \mu \rho) \tag{6.52}$$

das asymptotische Verhalten der Wahrscheinlichkeit

$$\frac{Z(\wedge_k, \phi, \phi, \beta, \mu, I_1 \times I_2 \times \mathbb{R})}{Z(\wedge_k, \phi, \beta, \mu)} \tag{6.53}$$

für $k \rightarrow \infty$, wobei $\{\wedge_k\}$ wie in Satz 6.11 ist.

Da wir nicht wissen, ob $\hat{s}(\rho, \phi, x)$ in (ρ, x) auf $(0, 1) \times \mathbb{R}$ halbstetig von oben ist, können wir im allgemeinen nicht feststellen, ob die Funktion (6.52) ihr Supremum über alle $(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ annimmt. Wird das Supremum jedoch angenommen, so folgt aus der Konkavität von $\hat{s}(\rho, \phi, x)$ in (ρ, x) auf $\text{int}\{(\rho, x) : \hat{s}(\rho, \phi, x) > -\infty\}$, daß die Menge $D(\beta, \mu)$ aller Punkte $(\rho, x) \in \text{int}\{(\rho, x) : \hat{s}(\rho, \phi, x) > -\infty\}$, in denen das Supremum angenommen wird, konvex ist.

Seien $I_1 \subset (0,1)$ und $I_2 \subset \mathbb{R}$ offene Intervalle derart, daß der Abstand von $I_1 \times I_2$ zu $D(\beta, \mu)$ größer als Null ist. Dann strebt für $k \rightarrow \infty$ die Wahrscheinlichkeit

$$\frac{Z(\Lambda_k, \Phi, \beta, \mu, I_1 \times I_2 \times \mathbb{R})}{Z(\Lambda_k, \Phi, \beta, \mu)} \quad (6.54)$$

wie $e^{-cn(\Lambda_k)}$, $c > 0$, gegen Null.

Wird das Supremum in genau einem Punkt (ρ_0, x_0) angenommen, dann sind ρ_0 und x_0 die thermodynamischen Limites der Erwartungswerte von $\frac{1}{n(\Lambda)} N(\Lambda)$ und $\frac{1}{n(\Lambda)} U_\Phi(\Lambda)$ bezüglich des großkanonischen Ensembles $w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu)$.

Satz 6.12:

Sei $\Phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a)) U_\Phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Seien $\beta_0, \mu_0 \in \mathbb{R}$ derart, daß die Funktion

$$(\rho, x) \mapsto (\hat{s}(\rho, \phi, x) - \beta_0 x + \beta_0 \mu_0 \rho) \quad (6.55)$$

ihr Supremum über alle $(\rho, x) \in (0,1) \times \mathbb{R}$ in genau einem Punkt $(\rho_0(\beta_0, \mu_0), x_0(\beta_0, \mu_0))$ annimmt. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \text{a) } \lim_{k \rightarrow \infty} & \frac{\text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} \exp \{ \beta_0 \mu_0 N(\Lambda_k) - \beta_0 U_\Phi(\Lambda_k) \} \frac{1}{n(\Lambda_k)} U_\Phi(\Lambda_k)}{\text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} \exp \{ \beta_0 \mu_0 N(\Lambda_k) - \beta_0 U_\Phi(\Lambda_k) \}} \\ & = x_0(\beta_0, \mu_0) \quad . \end{aligned} \quad (6.56)$$

$$\begin{aligned}
 b) \quad \lim_{k \rightarrow \infty} & \frac{\text{Tr}_{H(\Lambda_k)} \exp \{ \beta_o \mu_o N(\Lambda_k) - \beta_o U_\phi(\Lambda_k) \} \frac{1}{n(\Lambda_k)} N(\Lambda_k)}{\text{Tr}_{H(\Lambda_k)} \exp \{ \beta_o \mu_o N(\Lambda_k) - \beta_o U_\phi(\Lambda_k) \}} \\
 & = \rho_o(\beta_o, \mu_o) \quad . \quad (6.57)
 \end{aligned}$$

Der Beweis von Satz 6.12 ist analog zu dem von Satz 5.8 .

Analog zum mikrokanonischen und kanonischen Ensemble analysieren wir jetzt die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_\psi(\Lambda)$ bezüglich des großkanonischen Ensembles $w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu)$ im Grenzfall eines unendlich großen Systems. Dazu führen wir die zu $d^{\text{mic}}(\phi, \psi, y; v, x)$ und $d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta)$ analoge Größe ein.

Definition 6.13:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Sei $\rho \in (0, 1]$ und seien $\beta, \mu \in \mathbb{R}$. Dann definieren wir:

$$\begin{aligned}
 d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) & := \\
 & = \sup_{(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x + \beta \mu \rho) - \beta p(\phi, \beta, \mu) \quad . \quad (6.58)
 \end{aligned}$$

Lemma 6.14:

$d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta)$ ist in y auf $\text{int}\{y : d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) > -\infty\}$ konkav mit

$$\sup_{y \in \mathbb{R}} d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) = 0 \quad . \quad (6.59)$$

Beweis: Da $\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y)$ in (ρ, x, y) auf $\text{int } \hat{E}(\phi, \psi)$ konkav ist, ist mit Lemma A.5

$$\sup_{(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x + \beta \mu \rho) \quad (6.60)$$

konkav in y auf $\text{int } \{y : d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) > -\infty\}$, und damit auch $d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta)$. Die Gleichung (6.60) folgt aus Satz 6.10.a mit

$$\sup_{y \in \mathbb{R}} \hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) = \hat{s}(\rho, \phi, x) \quad (6.61)$$

Q.E.D.

Satz 6.15:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a)) U_\phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a)) U_\psi(\Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei

$$y_{\min}(\mu, \beta) := \inf \{y : d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) > -\infty\} \quad (6.62)$$

$$y_{\max}(\mu, \beta) = \sup \{y : d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) > -\infty\} \quad (6.63)$$

Sei $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall derart, daß entweder

- (i) $I \cap (y_{\min}(\mu, \beta), y_{\max}(\mu, \beta)) \neq \emptyset$ oder
- (ii) der Abstand von I zu $(y_{\min}(\mu, \beta), y_{\max}(\mu, \beta))$ größer als Null ist.

Dann gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\Lambda_k)} \log \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} w^{\text{mac}}(\Lambda_k, \phi, \beta, \mu) \sum_{\frac{1}{n(\Lambda_k)} \alpha_j^{\Lambda_k} \in I} P(\alpha_j^{\Lambda_k})$$

$$= \sup_{y \in I} d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) \quad (6.64)$$

Beweis: Mit den Sätzen 6.6 und 6.9.a gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\Lambda_k)} \log \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} w^{\text{mac}}(\Lambda_k, \phi, \beta, \mu) \sum_{\frac{1}{n(\Lambda_k)} \alpha_j^{\Lambda_k} \in I} P(\alpha_j^{\Lambda_k})$$

$$= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\Lambda_k)} (\log Z(\Lambda_k, \phi, \psi, \beta, \mu, \mathbb{R} \times \mathbb{R} \times I) - \log Z(\Lambda_k, \phi, \beta, \mu))$$

$$= \sup_{(\rho, x, y) \in (0, 1) \times \mathbb{R}^2} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y) - \beta x + \beta \mu \rho)$$

$$- \beta p(\phi, \beta, \mu) \quad (6.65)$$

Q.E.D.

Sei $\{\Lambda_k\}$ wie in Satz 6.15. Dann können wir mittels Satz 6.15 aus der Funktion $y \mapsto d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta)$ die asymptotische Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda_k)} U_\psi(\Lambda_k)$ bezüglich des großkanonischen Ensembles $w^{\text{mac}}(\Lambda_k, \phi, \beta, \mu)$ für $k \rightarrow \infty$ bestimmen. Da eine Aussage über die Halbstetigkeit von oben fehlt, können wir im allgemeinen nicht feststellen, daß die Funktion $y \mapsto d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta)$ ihr Supremum über alle $y \in \mathbb{R}$ annimmt. Aus der Konkavität von $d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta)$ auf $(y_{\min}(\mu, \beta), y_{\max}(\mu, \beta))$ können wir lediglich schließen, daß die Menge aller Punkte $y_0 \in (y_{\min}(\mu, \beta), y_{\max}(\mu, \beta))$ mit $d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y_0; \mu, \beta) = 0$ konvex ist.

Wir nehmen nun an, daß das Supremum auf der nicht-leeren Menge $T(\mu, \beta)$ angenommen wird. Sei $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall derart, daß der Abstand von I zu $T(\mu, \beta)$ größer als Null ist. Dann strebt für $k \rightarrow \infty$ die Wahrscheinlichkeit

$$\text{Tr}_{H(\Lambda_k)} w^{\text{mac}}(\Lambda_k, \phi, \beta, \mu) \sum_{\frac{1}{n(\Lambda_k)} \alpha_j^{\Lambda_k} \in I} P(\alpha_j^{\Lambda_k}) \quad (6.66)$$

wie $e^{-cn(\Lambda_k)}$, $c > 0$, gegen Null. Wird das Supremum in genau einem Punkt y_0 angenommen, dann strebt also für $k \rightarrow \infty$ die Verteilungsfunktion der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda_k)} U_\psi(\Lambda_k)$ gegen eine Heaviside-Funktion mit der Sprungstelle y_0 . In diesem Fall ist y_0 der thermodynamische Limes des Erwartungswerts von $\frac{1}{n(\Lambda_k)} U_\psi(\Lambda_k)$ bezüglich des großkanonischen Ensembles $w^{\text{mac}}(\Lambda_k, \phi, \beta, \mu)$.

Satz 6.16:

Seien $\phi, \psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a)) U_\phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a)) U_\psi(\Lambda(a))$ auf $H(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Seien μ_0 und β_0 derart, daß die Funktion $y \mapsto d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu_0, \beta_0)$ ihr Supremum über alle $y \in \mathbb{R}$ in genau einem Punkt $y_0(\mu_0, \beta_0)$ annimmt. Dann gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{H(\Lambda_k)} w^{\text{mac}}(\Lambda_k, \phi, \beta_0, \mu_0) \frac{1}{n(\Lambda_k)} U_\psi(\Lambda_k) = y_0(\mu_0, \beta_0) \quad (6.67)$$

Beweis: Sei $\varepsilon > 0$ und sei $I \subset \mathbb{R}$ ein offenes Intervall mit $I \cap [y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon] = \emptyset$. Dann folgt aus Satz 6.15 :

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{mac}}(\wedge_k, \phi, \beta_0, \mu_0) \sum_{\frac{1}{n(\wedge_k)} \alpha_j^{\wedge_k} \in (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon)} P(\alpha_j^{\wedge_k}) = 1, \quad (6.68)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{mac}}(\wedge_k, \phi, \beta_0, \mu_0) \sum_{\frac{1}{n(\wedge_k)} \alpha_j^{\wedge_k} \in I} P(\alpha_j^{\wedge_k}) = 0. \quad (6.69)$$

Mit (2.15) existiert ein $C \in \mathbb{R}$, so daß für alle $k \in \mathbb{N}$

$$\left\| \frac{1}{n(\wedge_k)} U_{\psi}(\wedge_k) \right\| \leq C \quad (6.70)$$

ist. Damit gilt für jedes $k \in \mathbb{N}$:

$$(y_0 - \varepsilon) \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{mac}}(\wedge_k, \phi, \beta_0, \mu_0) \sum_{\frac{1}{n(\wedge_k)} \alpha_j^{\wedge_k} \in (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon)} P(\alpha_j^{\wedge_k})$$

$$- C \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{mac}}(\wedge_k, \phi, \beta_0, \mu_0) \sum_{\frac{1}{n(\wedge_k)} \alpha_j^{\wedge_k} \notin (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon)} P(\alpha_j^{\wedge_k})$$

$$\equiv \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{mac}}(\wedge_k, \phi, \beta_0, \mu_0) \frac{1}{n(\wedge_k)} U_{\psi}(\wedge_k)$$

$$\begin{aligned} & \cong (y_0 + \varepsilon) \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{mac}}(\wedge_k, \phi, \beta_0, \mu_0) \sum_{\substack{\alpha_j^{\wedge_k} \in (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon) \\ \frac{1}{n(\wedge_k)}}} P(\alpha_j^{\wedge_k}) \\ & + C \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{mac}}(\wedge_k, \phi, \beta_0, \mu_0) \sum_{\substack{\alpha_j^{\wedge_k} \notin (y_0 - \varepsilon, y_0 + \varepsilon) \\ \frac{1}{n(\wedge_k)}}} P(\alpha_j^{\wedge_k}). \quad (6.71) \end{aligned}$$

Betrachten wir nun den Limes $k \rightarrow \infty$, so erhalten wir mit (6.68) und (6.69):

$$\begin{aligned} y_0 - \varepsilon & \cong \liminf_{k \rightarrow \infty} \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{mac}}(\wedge_k, \phi, \beta_0, \mu_0) \frac{1}{n(\wedge_k)} U_{\Psi}(\wedge_k) \\ & \cong \limsup_{k \rightarrow \infty} \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{mac}}(\wedge_k, \phi, \beta_0, \mu_0) \frac{1}{n(\wedge_k)} U_{\Psi}(\wedge_k) \\ & \cong y_0 + \varepsilon. \quad (6.72) \end{aligned}$$

Da $\varepsilon > 0$ beliebig war, folgt (6.67).

Q.E.D.

Zum Abschluß diskutieren wir den Fall, daß die Funktion $y \mapsto d^{\text{mac}}(\phi, \Psi, y; \mu, \beta)$ ihr Supremum über alle $y \in \mathbb{R}$ nicht annimmt. Da $d^{\text{mac}}(\phi, \Psi, y; \mu, \beta)$ in y auf $(y_{\min}(\mu, \beta), y_{\max}(\mu, \beta))$ stetig ist, gilt entweder

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{y \rightarrow y_{\min}(\mu, \beta) \\ y > y_{\min}(\mu, \beta)}} d^{\text{mac}}(\phi, \Psi, y; \mu, \beta) & = 0 \quad (6.73) \end{aligned}$$

oder

$$\lim_{\substack{y \rightarrow y_{\max}(\mu, \beta) \\ y < y_{\max}(\mu, \beta)}} d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) = 0 \quad (6.74)$$

Sei nun $\{\wedge_k\}$ wie in Satz 6.15. Dann ist nach Satz 6.15 für jedes $\varepsilon > 0$ entweder

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{mac}}(\wedge_k, \phi, \beta, \mu) \sum_{\substack{\alpha_j^{\wedge_k} \in (y_{\min}(\mu, \beta) - \varepsilon, y_{\min}(\mu, \beta) + \varepsilon)}} P(\alpha_j^{\wedge_k}) = 1 \quad (6.75)$$

oder

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{mac}}(\wedge_k, \phi, \beta, \mu) \sum_{\substack{\alpha_j^{\wedge_k} \in (y_{\max}(\mu, \beta) - \varepsilon, y_{\max}(\mu, \beta) + \varepsilon)}} P(\alpha_j^{\wedge_k}) = 1 \quad (6.76)$$

Analog zum Beweis von Satz 6.16 können wir dann schließen, daß entweder

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{mac}}(\wedge_k, \phi, \beta, \mu) \frac{1}{n(\wedge_k)} U_{\psi}(\wedge_k) = y_{\min}(\mu, \beta) \quad (6.77)$$

oder

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} w^{\text{mac}}(\wedge_k, \phi, \beta, \mu) \frac{1}{n(\wedge_k)} U_{\psi}(\wedge_k) = y_{\max}(\mu, \beta) \quad (6.78)$$

ist.

Fazit: Im Grenzfall eines unendlich großen Systems gibt es für die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des großkanonischen Ensembles $w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu)$ nur die beiden folgenden Möglichkeiten:

- a) Entweder strebt die entsprechende Verteilungsfunktion gegen eine Heaviside-Funktion, oder
- b) die asymptotische Verteilungsfunktion ist außerhalb eines abgeschlossenen Intervalls Null bzw. Eins. Über die Wahrscheinlichkeitsverteilung innerhalb dieses Intervalls können wir nichts aussagen.

Im Fall (a) ist der thermodynamische Limes des Erwartungswerts von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des großkanonischen Ensembles $w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu)$ gleich dem Wert, in dem die asymptotische Verteilungsfunktion ihren Sprung hat.

7. DIE THERMODYNAMISCHE ÄQUIVALENZ DER DREI GIBBSSCHEN ENSEMBLES

In der Thermodynamik werden zwei Zustandsfunktionen äquivalent genannt, wenn sie durch Legendre-Transformationen ineinander überführbar sind. Damit die Legendre-Transformation einer reellwertigen Funktion in einem offenen Intervall $I \subset \mathbb{R}$ definiert ist, muß diese Funktion in dem Intervall I stetig differenzierbar und streng konvex (oder streng konkav) sein. Diese Forderung an eine Zustandsfunktion bedeutet, daß das durch sie beschriebene physikalische System bei einer beliebigen Variation der entsprechenden Variablen in dem Intervall I keinen Phasenübergang 1. Art besitzen darf. Da wir in unseren Betrachtungen Phasenübergänge nicht ausgeschlossen haben, ja sogar Hinweise auf Phasenübergänge erhielten, können wir nicht erwarten, daß die durch die drei Gibbsschen Ensembles definierten statistischen Analoga thermodynamischer Potentiale $\hat{s}(\rho, \phi, x)$, $\hat{f}(\rho, \phi, \beta)$ und $p(\phi, \beta, \mu)$ im allgemeinen durch Legendre-Transformationen ineinander überführbar sind. Es gelten jedoch die folgenden Relationen (Satz 5.5.b und Satz 6.10):

$$-\beta \hat{f}(\rho, \phi, \beta) = \sup_{x \in \mathbb{R}} (\hat{s}(\rho, \phi, x) - \beta x) \quad . \quad (7.1)$$

$$\beta p(\phi, \beta, \mu) = \sup_{(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}} (\hat{s}(\rho, \phi, x) - \beta x + \beta \mu \rho) \quad . \quad (7.2)$$

$$\beta p(\phi, \beta, \mu) = \sup_{\rho \in (0, 1)} (-\beta \hat{f}(\rho, \phi, \beta) + \beta \mu \rho) \quad . \quad (7.3)$$

Nach dem Satz von Fenchel über konjugiert-konvexe Funktionen (Lemma A.10) sind durch die obigen Relationen mit jeder der drei Funktionen auch die beiden anderen eindeutig gegeben.

Ist eine der Funktionen in einer Variablen in einem offenen Intervall streng konvex und stetig differenzierbar, so sind die beiden anderen Funktionen in der konjugierten Variablen in entsprechenden Intervallen ebenfalls streng konvex und stetig differenzierbar. In diesem Fall gehen die Relationen (7.1)-(7.3) in Legendre-Transformationen über (siehe A.11 und A.12) .

Bemerkung 7.1:

Für den Druck $p(\phi, \beta, \mu)$ kann man zeigen [17,39] , daß er unter gewissen Bedingungen an das Potential ϕ , die in unserem Fall erfüllt sind, eine streng konvexe Funktion sowohl in β als auch in μ ist. Insbesondere ist dann mit A.12 $\hat{s}(\rho, \phi, x)$ und damit auch $s(v, \phi, x)$ in x differenzierbar.

8. DIE STATISTISCHE ÄQUIVALENZ DER DREI GIBBSSCHEN ENSEMBLES

Nachdem wir in den Kapiteln 4 bis 6 gesehen haben, daß im Grenzfall eines unendlich großen Systems die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich der drei Gibbsschen Ensembles qualitativ gleich sind, untersuchen wir in diesem Kapitel die Frage, welche Relationen zwischen diesen Wahrscheinlichkeitsverteilungen bestehen. Zum Beispiel fragen wir danach, unter welchen Bedingungen die asymptotischen Verteilungsfunktionen bezüglich des mikrokanonischen und des kanonischen Ensembles Heaviside-Funktionen mit gleicher Sprungstelle sind. Wir vergleichen die asymptotischen Verteilungsfunktionen paarweise mit Hilfe der Funktionen $d^{\text{mic}}(\phi, \Psi, y; v, x)$, $d^{\text{can}}(\phi, \Psi, y; v, \beta)$ und $d^{\text{mac}}(\phi, \Psi, y; \mu, \beta)$. Dazu erinnern wir uns an die Bedeutung dieser Funktionen: In den Punkten y_0 , in denen sie Werte kleiner als Null haben, sind die entsprechenden asymptotischen Verteilungsfunktionen der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_{\Psi}(\Lambda)$ entweder Null oder Eins.

8.1 DIE STATISTISCHE ÄQUIVALENZ DES MIKROKANONISCHEN UND DES KANONISCHEN ENSEMBLES

Vergleichen wir die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des mikrokanonischen Ensembles $w^{\text{mic}}(\Lambda, n, \phi, I(x))$ und bezüglich des kanonischen Ensembles $w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta)$ im Grenzfall eines unendlich großen Systems miteinander, wobei wir nach dem thermodynamischen Limes $I(x)$ gegen $\{x\}$ streben lassen, so erhalten wir folgende allgemeine Äquivalenzaussage:

Satz 8.1:

Die Aussagen

$$(a) \quad d^{\text{can}}(\phi, \psi, y_0; v, \beta) = 0 \quad \text{und} \quad (8.1)$$

(b) Es existiert ein $x_0 \in \mathbb{R}$, so daß gilt:

$$- \beta f(v, \phi, \beta) = s(v, \phi, x_0) - \beta x_0, \quad (8.2)$$

$$d^{\text{mic}}(\phi, \psi, y_0; v, x_0) = 0. \quad (8.3)$$

sind äquivalent.

Beweis: Es existiere ein $x_0 \in \mathbb{R}$ mit den Eigenschaften (8.2) und (8.3). Aus (8.3) folgt:

$$s(v, \phi, x_0) = s(v, \phi, \psi, x_0, y_0). \quad (8.4)$$

Setzen wir (8.4) in (8.2) ein, so erhalten wir:

$$- \beta f(v, \phi, \beta) = s(v, \phi, \psi, x_0, y_0) - \beta x_0. \quad (8.5)$$

Also ist

$$\begin{aligned} & \sup_{x \in \mathbb{R}} (s(v, \phi, \psi, x, y_0) - \beta x) + \beta f(v, \phi, \beta) \\ &= d^{\text{can}}(\phi, \psi, y_0; v, \beta) \quad \equiv \quad 0. \end{aligned} \quad (8.6)$$

Nach Lemma 4.33 ist jedoch

$$\sup_{y \in \mathbb{R}} d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta) = 0, \quad (8.7)$$

so daß (8.1) folgt. .

Umgekehrt, sei $d^{\text{can}}(\phi, \psi, y_0; v, \beta) \neq 0$, d.h. sei

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} (s(v, \phi, \psi, x, y_0) - \beta x) = -\beta f(v, \phi, \beta) . \quad (8.8)$$

Da die Abbildung $x \mapsto (s(v, \phi, \psi, x, y_0) - \beta x)$ auf $\mathbb{R}$ halbstetig von oben und konkav ist, und da die Menge $\{x : s(v, \phi, \psi, x, y_0) > -\infty\}$ beschränkt ist, nimmt die Funktion ihr Supremum über alle $x \in \mathbb{R}$ in mindestens einem Punkt x_0 an. Also gilt:

$$s(v, \phi, \psi, x_0, y_0) - \beta x_0 = -\beta f(v, \phi, \beta) . \quad (8.9)$$

Damit ist

$$\begin{aligned} -\beta f(v, \phi, \beta) &= s(v, \phi, \psi, x_0, y_0) - \beta x_0 \\ &\cong \sup_{y \in \mathbb{R}} s(v, \phi, \psi, x_0, y) - \beta x_0 \\ &= s(v, \phi, x_0) - \beta x_0 \\ &\cong \sup_{x \in \mathbb{R}} (s(v, \phi, x) - \beta x) \\ &= -\beta f(v, \phi, \beta) . \end{aligned} \quad (8.10)$$

Daraus folgt:

$$0 = s(v, \phi, \psi, x_0, y_0) - s(v, \phi, x_0) = d^{\text{mic}}(\phi, \psi, y_0; v, x_0) . \quad (8.11)$$

Q.E.D.

Einige Spezialfälle von Satz 8.1 fassen wir in einem Korollar zusammen.

Korollar 8.2:

a) Ist y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta) = 0, \quad (8.12)$$

dann existiert ein $x_0 \in \mathbb{R}$ mit

$$-\beta f(v, \phi, \beta) = s(v, \phi, x_0) - \beta x_0, \quad (8.13)$$

so daß y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{mic}}(\phi, \psi, y; v, x_0) = 0 \quad (8.14)$$

ist.

b) Ist x_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$-\beta f(v, \phi, \beta) = s(v, \phi, x) - \beta x \quad (8.15)$$

und ist y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{mic}}(\phi, \psi, y; v, x_0) = 0, \quad (8.16)$$

dann ist y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta) = 0. \quad (8.17)$$

c) Sei β_0 derart, daß x_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$-\beta_0 f(v, \phi, \beta_0) = s(v, \phi, x) - \beta_0 x \quad (8.18)$$

ist. Dann ist y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{can}}(\phi, \psi, y; v, \beta_0) = 0 \quad (8.19)$$

genau dann, wenn y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{mic}}(\phi, \psi, y; v, x_0) = 0 \quad (8.20)$$

ist.

Wie wir sehen, geht in die Äquivalenzaussagen ganz entscheidend die durch die Gleichung

$$-\beta f(v, \phi, \beta) = s(v, \phi, x) - \beta x \quad (8.21)$$

gegebene Relation zwischen dem Parameter β des kanonischen Ensembles und dem Parameter x des mikrokanonischen Ensembles ein. Ist diese Relation zum Beispiel für β_0 und x_0 eineindeutig, dann sind für alle $\psi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$ die Verteilungsfunktionen der Eigenwerte von $\frac{1}{n}U_\psi(\Lambda)$ bezüglich des mikrokanonischen Ensembles $w^{\text{mic}}(\Lambda, n, \phi, I(x_0))$ und bezüglich des kanonischen Ensembles $w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta_0)$ im Grenzfall eines unendlich großen Systems und für $I(x_0) \rightarrow \{x_0\}$ Heaviside-Funktionen mit jeweils gleicher Sprungstelle y_0^ψ . In diesem Fall ist y_0^ψ sowohl der thermodynamische Limes des Erwartungswerts von $\frac{1}{n}U_\psi(\Lambda)$ bezüglich des mikrokanonischen Ensembles $w^{\text{mic}}(\Lambda, n, \phi, I(x_0))$, wobei wir nach dem thermodynamischen Limes $I(x_0)$ gegen $\{x_0\}$ streben lassen, als auch der thermodynamische Limes des Erwartungswerts von $\frac{1}{n}U_\psi(\Lambda)$ bezüglich des kanonischen Ensembles $w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta_0)$.

Satz 8.3:

Seien $\phi, \psi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a))U_\phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a))U_\psi(\Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß

wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\Lambda_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n(\Lambda_k)}{n_k} = v > 1. \quad (8.22)$$

Sei β_0 derart, daß die Funktion $x \mapsto (s(v, \Phi, x) - \beta_0 x)$ ihr Supremum über alle $x \in \mathbb{R}$ in genau einem Punkt x_0 annimmt und daß die Funktion $y \mapsto s(v, \Phi, \Psi, x_0, y)$ ihr Supremum über alle $y \in \mathbb{R}$ in genau einem Punkt y_0 annimmt. Sei $\{I_1(x_0)\}$ eine Folge offener Intervalle $I_1(x_0) \subset \mathbb{R}$ mit $x_0 \in I_1(x_0)$ für alle $1 \in \mathbb{N}$, die gegen $\{x_0\}$ konvergiert. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \text{a) } & \lim_{l \rightarrow \infty} \lim_{k \rightarrow \infty} (\inf, \sup) \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} w^{\text{mic}}(\Lambda_k, n_k, \Phi, I_1(x_0)) \frac{1}{n_k} U_{\Psi}(\Lambda_k) \\ & = y_0. \end{aligned} \quad (8.23)$$

$$\text{b) } \lim_{k \rightarrow \infty} \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} w^{\text{can}}(\Lambda_k, n_k, \Phi, \beta_0) \frac{1}{n_k} U_{\Psi}(\Lambda_k) = y_0. \quad (8.24)$$

Beweis: Die Aussage (a) haben wir bereits mit Satz 4.35 bewiesen. Mit Korollar 8.2.b ist die Aussage (b) äquivalent zu Satz 5.12.

Q.E.D.

8.2 DIE STATISTISCHE ÄQUIVALENZ DES MIKROKANONISCHEN UND DES GROSSKANONISCHEN ENSEMBLES

Vergleichen wir die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda)}U_{\Psi}(\Lambda)$ bezüglich des mikrokanonischen Ensembles $W^{\text{mic}}(\Lambda, n, \Phi, I(x))$ und bezüglich des großkanonischen Ensembles $W^{\text{mac}}(\Lambda, \Phi, \beta, \mu)$ im Grenzfall eines unendlich großen Systems miteinander, wobei wir nach dem thermodynamischen Limes $I(x)$ gegen $\{x\}$ streben lassen, so erhalten wir folgende allgemeine Äquivalenzaussage:

Satz 8.4:

Die beiden folgenden Aussagen sind äquivalent:

$$(a) \quad d^{\text{mac}}(\Phi, \Psi, y_0; \mu, \beta) = 0 \quad (8.25)$$

und die Funktion $(\rho, x) \mapsto (\hat{s}(\rho, \Phi, \Psi, x, y_0) - \beta x + \beta \mu \rho)$ nimmt ihr Supremum über alle $(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ an.

(b) Es existiert ein $(\rho_0, x_0) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$, so daß gilt:

$$\beta p(\Phi, \beta, \mu) = \hat{s}(\rho_0, \Phi, \Psi, x_0, y_0) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0, \quad (8.26)$$

$$d^{\text{mic}}(\Phi, \Psi, \frac{y_0}{\rho_0}, \frac{1}{\rho_0}, \frac{x_0}{\rho_0}) = 0. \quad (8.27)$$

Beweis: Es existiere ein $(\rho_0, x_0) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ mit den Eigenschaften (8.26) und (8.27). Aus (8.27) folgt:

$$\hat{s}(\rho_0, \Phi, \Psi, x_0, y_0) = \hat{s}(\rho_0, \Phi, x_0). \quad (8.28)$$

Damit gilt:

$$\beta p(\phi, \beta, \mu) = \hat{s}(\rho_0, \phi, \psi, x_0, y_0) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0 . \quad (8.29)$$

Also ist

$$\begin{aligned} & \sup_{(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y_0) - \beta x + \beta \mu \rho) - \beta p(\phi, \beta, \mu) \\ &= d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y_0; \mu, \beta) \geq 0 . \end{aligned} \quad (8.30)$$

Nach Lemma 6.14 ist jedoch

$$\sup_{y \in \mathbb{R}} d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) = 0 , \quad (8.31)$$

so daß (8.25) folgt.

Umgekehrt gelte (a), d.h. es existiere ein $(\rho_0, x_0) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ mit

$$\beta p(\phi, \beta, \mu) = \hat{s}(\rho_0, \phi, \psi, x_0, y_0) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0 . \quad (8.32)$$

Dann gilt:

$$\begin{aligned} \beta p(\phi, \beta, \mu) &= \hat{s}(\rho_0, \phi, \psi, x_0, y_0) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0 \\ &\leq \sup_{y \in \mathbb{R}} \hat{s}(\rho_0, \phi, \psi, x_0, y) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0 \\ &= \hat{s}(\rho_0, \phi, x_0) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0 \\ &\leq \sup_{(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}} (\hat{s}(\rho, \phi, x) - \beta x + \beta \mu \rho) \\ &= \beta p(\phi, \beta, \mu) . \end{aligned} \quad (8.33)$$

Daraus folgt:

$$\hat{s}(\rho_0, \phi, \psi, x_0, y_0) - \hat{s}(\rho_0, \phi, x_0) = 0 \quad (8.34)$$

Mit der Definition 4.32 folgt dann die Behauptung.

Q.E.D.

Einige Spezialfälle von Satz 8.4 fassen wir in einem Korollar zusammen.

Korollar 8.5:

a) Ist y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) = 0 \quad (8.35)$$

und nimmt die Funktion $(\rho, x) \mapsto (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y_0) - \beta x + \beta \mu \rho)$ ihr Supremum über alle $(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ an, dann existiert ein $(\rho_0, x_0) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ mit

$$\beta p(\phi, \beta, \mu) = \hat{s}(\rho_0, \phi, x_0) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0, \quad (8.36)$$

so daß y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{mic}}(\phi, \psi, \frac{y}{\rho_0}; \frac{1}{\rho_0}, \frac{x_0}{\rho_0}) = 0 \quad (8.37)$$

ist.

b) Ist (ρ_0, x_0) die einzige Lösung der Gleichung

$$\beta p(\phi, \beta, \mu) = \hat{s}(\rho, \phi, x) - \beta x + \beta \mu \rho \quad (8.38)$$

und ist y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{mic}}(\phi, \psi, \frac{y}{\rho_0}; \frac{1}{\rho_0}, \frac{x_0}{\rho_0}) = 0, \quad (8.39)$$

dann ist y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) = 0 \quad . \quad (8.40)$$

c) Sei (μ_0, β_0) derart, daß (ρ_0, x_0) die einzige Lösung der Gleichung

$$\beta_0 p(\phi, \beta_0, \mu_0) = \hat{s}(\rho, \phi, x) - \beta_0 x + \beta_0 \mu_0 \rho \quad (8.41)$$

ist. Dann ist y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu_0, \beta_0) = 0 \quad , \quad (8.42)$$

wobei die Funktion $(\rho, x) \mapsto (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y_0) - \beta_0 x + \beta_0 \mu_0 \rho)$ ihr Supremum über alle $(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ annimmt, genau dann, wenn y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{mic}}(\phi, \psi, \frac{y}{\rho_0}; \frac{1}{\rho_0}, \frac{x_0}{\rho_0}) = 0 \quad (8.43)$$

ist.

Wie wir sehen, geht in die Äquivalenzaussagen ganz entscheidend die durch die Gleichung

$$\beta p(\phi, \beta, \mu) = \hat{s}(\rho, \phi, x) - \beta x + \beta \mu \rho \quad (8.44)$$

gegebene Relation zwischen den Parametern β und μ des großkanonischen Ensembles und den Parametern x und v des mikrokanonischen Ensembles ein. Ist diese Relation zum Beispiel für (β_0, μ_0) und (x_0, v_0) eineindeutig, dann sind für alle $\psi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$ die Verteilungsfunktionen der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_\psi(\Lambda)$ bezüglich des mikrokanonischen Ensembles $w^{\text{mic}}(\Lambda, n, \phi, I(x_0))$ und

bezüglich des großkanonischen Ensembles $w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta_0, \mu_0)$ im Grenzfalle eines unendlich großen Systems und für $I(x_0) \rightarrow \{x_0\}$ Heaviside-Funktionen mit jeweils gleicher Sprungstelle y_0^ψ . In diesem Falle ist y_0^ψ sowohl der thermodynamische Limes des Erwartungswerts von $\frac{1}{n(\Lambda)}U_\psi(\Lambda)$ bezüglich des mikrokanonischen Ensembles $w^{\text{mic}}(\Lambda, n, \phi, I(x_0))$, wobei wir nach dem thermodynamischen Limes $I(x_0)$ gegen $\{x_0\}$ streben lassen, als auch der thermodynamische Limes des Erwartungswerts von $\frac{1}{n(\Lambda)}U_\psi(\Lambda)$ bezüglich des großkanonischen Ensembles $w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta_0, \mu_0)$.

Satz 8.6:

Seien $\phi, \psi \in B_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a))U_\phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a))U_\psi(\Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\Lambda_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n_k}{n(\Lambda_k)} = \rho_0, \quad (8.45)$$

Sei (μ_0, β_0) derart, daß die Funktion $(\rho, x) \mapsto (s(\rho, \phi, x) - \beta_0 x + \beta_0 \mu_0 \rho)$ ihr Supremum über alle $(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ in genau einem Punkt (ρ_0, x_0) annimmt und daß die Funktion $y \mapsto s(\rho_0, \phi, \psi, x_0, y)$ ihr Supremum über alle $y \in \mathbb{R}$ in genau einem Punkt y_0 annimmt. Sei $\{I_1(x_0)\}$ eine Folge offener Intervalle $I_1(x_0) \subset \mathbb{R}$ mit $x_0 \in I_1(x_0)$ für alle $l \in \mathbb{N}$, die gegen $\{x_0\}$ konvergiert. Dann gilt:

$$a) \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} w^{\text{mac}}(\Lambda_k, \phi, \beta_0, \mu_0) \frac{1}{n(\Lambda_k)} U_\psi(\Lambda_k) = y_0. \quad (8.46)$$

$$\begin{aligned}
 \text{b) } \lim_{l \rightarrow \infty} \lim_{k \rightarrow \infty} (\inf, \sup) \operatorname{Tr}_{\mathbb{H}(\Lambda_k)} w^{\text{mic}}(\Lambda_k, n_k, \phi, I_1(x_0)) \frac{1}{n(\Lambda_k)} U_{\psi}(\Lambda_k) \\
 = y_0 \quad . \quad (8.47)
 \end{aligned}$$

Beweis: Die Aussage (b) wurde bereits mit Satz 4.35 bewiesen.
 Mit Korollar 8.5.b ist die Aussage (a) äquivalent zu Satz 6.16 .

Q.E.D.

8.3 DIE STATISTISCHE ÄQUIVALENZ DES KANONISCHEN UND DES GROSS-KANONISCHEN ENSEMBLES

Vergleichen wir die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_{\psi}(\Lambda)$ bezüglich des kanonischen Ensembles $w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta)$ und bezüglich des großkanonischen Ensembles $w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu)$ im Grenzfall eines unendlich großen Systems miteinander, so erhalten wir folgende allgemeine Äquivalenzaussage:

Satz 8.7:

Die beiden folgenden Aussagen sind äquivalent:

$$(a) \quad d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y_0; \mu, \beta) = 0 \quad (8.48)$$

und die Funktion $(\rho, x) \mapsto (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y_0) - \beta x + \beta \mu \rho)$ nimmt ihr Supremum über alle $(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ an.

(b) Es existiert ein $v_0 = \frac{1}{\rho_0} \in (1, \infty)$, so daß gilt:

$$\beta p(\phi, \beta, \mu) = -\beta \hat{f}(\rho_0, \phi, \beta) + \beta \mu \rho_0 \quad , \quad (8.49)$$

$$d^{\text{can}}(\phi, \psi, \frac{y_0}{\rho_0}; v_0, \beta) = 0 \quad . \quad (8.50)$$

Beweis: Es existiere ein $v_0 = \frac{1}{\rho_0} > 1$ derart, daß (8.49) und (8.50) gilt. Da die Funktion $x \mapsto (s(v_0, \phi, \psi, x, y_0) - \beta x)$ ihr Supremum über alle $x \in \mathbb{R}$ annimmt, folgt aus (8.50), daß ein $x_0 \in \mathbb{R}$ mit

$$\hat{s}(\rho_0, \phi, \psi, x_0, y_0) - \beta x_0 = -\beta \hat{f}(\rho_0, \phi, \beta) \quad (8.51)$$

existiert. Nun gilt mit (8.49) und (8.51) :

$$\begin{aligned} d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y_0; \mu, \beta) &= \sup_{(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}} (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y_0) - \beta x + \beta \mu \rho) \\ &\quad - \beta p(\phi, \beta, \mu) \\ &\cong \hat{s}(\rho_0, \phi, \psi, x_0, y_0) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0 - \beta p(\phi, \beta, \mu) \\ &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (8.52)$$

Nach Lemma 6.14 ist jedoch

$$\sup_{y \in \mathbb{R}} d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) = 0 \quad , \quad (8.53)$$

so daß die Aussage (a) folgt.

Umgekehrt gelte (a), d.h. es existiere ein $(\rho_0, x_0) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ mit

$$\hat{s}(\rho_0, \phi, \psi, x_0, y_0) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0 = \beta p(\phi, \beta, \mu) \quad . \quad (8.54)$$

Damit gilt:

$$\begin{aligned}
 \beta p(\phi, \beta, \mu) &= \hat{s}(\rho_0, \phi, \psi, x_0, y_0) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0 \\
 &\cong \sup_{y \in \mathbb{R}} \hat{s}(\rho_0, \phi, \psi, x_0, y) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0 \\
 &= \hat{s}(\rho_0, \phi, x_0) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0 \\
 &\cong \sup_{x \in \mathbb{R}} (\hat{s}(\rho_0, \phi, x) - \beta x) + \beta \mu \rho_0 \\
 &= -\beta \hat{f}(\rho_0, \phi, \beta) + \beta \mu \rho_0 \\
 &\cong \sup_{\rho \in (0, 1)} (-\beta \hat{f}(\rho, \phi, \beta) + \beta \mu \rho) \\
 &= \beta p(\phi, \beta, \mu) \quad . \quad (8.55)
 \end{aligned}$$

Daraus folgt:

$$\beta p(\phi, \beta, \mu) = -\beta \hat{f}(\rho_0, \phi, \beta) + \beta \mu \rho_0 \quad (8.56)$$

$$-\beta \hat{f}(\rho_0, \phi, \beta) = \sup_{x \in \mathbb{R}} (\hat{s}(\rho_0, \phi, \psi, x, y_0) - \beta x) \quad . \quad (8.57)$$

Q.E.D.

Einige Spezialfälle von Satz 8.7 fassen wir in einem Korollar zusammen.

Korollar 8.8:

a) Ist y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) = 0 \quad (8.58)$$

und nimmt die Funktion $(\rho, x) \mapsto (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y_0) - \beta x + \beta \mu \rho)$ ihr Supremum über alle $(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ an, dann existiert ein $\rho_0 \in (0, 1)$ mit

$$\beta p(\phi, \beta, \mu) = -\beta \hat{f}(\rho_0, \phi, \beta) + \beta \mu \rho_0, \quad (8.59)$$

so daß y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{can}}(\phi, \psi, \frac{y}{\rho_0}; \frac{1}{\rho_0}, \beta) = 0 \quad (8.60)$$

ist.

b) Ist $\rho_0 \in (0, 1)$ die einzige Lösung der Gleichung

$$\beta p(\phi, \beta, \mu) = -\beta \hat{f}(\rho, \phi, \beta) + \beta \mu \rho \quad (8.61)$$

und ist y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{can}}(\phi, \psi, \frac{y}{\rho_0}; \frac{1}{\rho_0}, \beta) = 0, \quad (8.62)$$

dann ist y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu, \beta) = 0 \quad (8.63)$$

und die Funktion $(\rho, x) \mapsto (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y_0) - \beta x + \beta \mu \rho)$ nimmt ihr Supremum über alle $(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ an.

c) Sei μ_0 derart, daß $\rho_0 \in (0, 1)$ die einzige Lösung der Gleichung

$$\beta p(\phi, \beta, \mu_0) = -\beta \hat{f}(\rho, \phi, \beta) + \beta \mu_0 \rho \quad (8.64)$$

ist. Dann ist y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{mac}}(\phi, \psi, y; \mu_0, \beta) = 0, \quad (8.65)$$

wobei die Funktion $(\rho, x) \mapsto (\hat{s}(\rho, \phi, \psi, x, y_0) - \beta x + \beta \mu_0 \rho)$ ihr Supremum über alle $(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ annimmt, genau dann, wenn y_0 die einzige Lösung der Gleichung

$$d^{\text{can}}(\phi, \psi, \frac{y}{\rho_0}; \frac{1}{\rho_0}, \beta) = 0 \quad (8.66)$$

ist.

Wie wir sehen, geht in die Äquivalenzaussagen ganz entscheidend die durch die Gleichung

$$\beta p(\phi, \beta, \mu) = -\beta \hat{p}(\rho, \phi, \beta) + \beta \mu \rho \quad (8.67)$$

gegebene Relation zwischen dem Parameter $v = \frac{1}{\rho}$ des kanonischen Ensembles und dem Parameter μ des großkanonischen Ensembles ein. Ist diese Relation zum Beispiel für v_0 und μ_0 eindeutig, dann sind für alle $\psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\kappa^\phi = \kappa^\psi$ die Verteilungsfunktionen der Eigenwerte von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_\psi(\Lambda)$ bezüglich des kanonischen Ensembles $w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta)$ und bezüglich des großkanonischen Ensembles $w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu_0)$ im Grenzfall eines unendlich großen Systems Heaviside-Funktionen mit jeweils gleicher Sprungstelle y_0^ψ . In diesem Fall ist y_0^ψ sowohl der thermodynamische Limes des Erwartungswerts von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_\psi(\Lambda)$ bezüglich des kanonischen Ensembles $w^{\text{can}}(\Lambda, n, \phi, \beta)$ als auch der thermodynamische Limes des Erwartungswerts von $\frac{1}{n(\Lambda)} U_\psi(\Lambda)$ bezüglich des großkanonischen Ensembles $w^{\text{mac}}(\Lambda, \phi, \beta, \mu_0)$.

Satz 8.9:

Seien $\Phi, \Psi \in B_{vac}$ mit $\kappa^\Phi = \kappa^\Psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a))U_\Phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a))U_\Psi(\Lambda(a))$ auf $H(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von Lanford unendlich groß wird. Sei $\{n_k\}$ eine Folge natürlicher Zahlen mit $n_k \leq n(\Lambda_k)$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n_k}{n(\Lambda_k)} = \rho_0. \quad (8.68)$$

Seien β_0 und μ_0 derart, daß die Funktion $(\rho, x) \mapsto (\hat{s}(\rho, \Phi, x) - \beta_0 x + \beta_0 \mu_0 \rho)$ ihr Supremum über alle $(\rho, x) \in (0, 1) \times \mathbb{R}$ in genau einem Punkt (ρ_0, x_0) annimmt und daß die Funktion $y \mapsto \hat{s}(\rho_0, \Phi, \Psi, x_0, y)$ ihr Supremum über alle $y \in \mathbb{R}$ in genau einem Punkt y_0 annimmt. Dann gilt:

$$a) \lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{H(\Lambda_k)} w^{\text{can}}(\Lambda_k, n_k, \Phi, \beta_0) \frac{1}{n(\Lambda_k)} U_\Psi(\Lambda_k) = y_0. \quad (8.69)$$

$$b) \lim_{k \rightarrow \infty} \text{Tr}_{H(\Lambda_k)} w^{\text{mac}}(\Lambda_k, \Phi, \beta_0, \mu_0) \frac{1}{n(\Lambda_k)} U_\Psi(\Lambda_k) = y_0. \quad (8.70)$$

Beweis: Mit Korollar 8.5.b und Korollar 8.8.b sind die Aussagen (a) und (b) zu den Sätzen 5.12 und 6.16 äquivalent.

Q.E.D.

9. UNENDLICH GROSSE SYSTEME

Bisher untersuchten wir die Eigenschaften endlicher Systeme im thermodynamischen Limes. In diesem Kapitel betrachten wir nun aktual unendlich große Systeme, die wir mittels des C^* -Algebra-Ansatzes beschreiben. Ein endliches (lokales) System $(\Lambda \subset \mathbb{Z}^V)$ beschreiben wir mittels der C^* -Algebra $\mathfrak{H}(\Lambda)$ der beschränkten linearen Operatoren auf dem Hilbertraum $\mathfrak{H}(\Lambda)$. Ein aktual unendlich großes System beschreiben wir nun mittels der quasilokalen C^* -Algebra $\mathfrak{H}$, die die lokalen C^* -Algebren $\mathfrak{H}(\Lambda)$ als Subalgebren enthält. Diese C^* -Algebra $\mathfrak{H}$ stellt den Normabschluß der Vereinigung der lokalen C^* -Algebren $\mathfrak{H}(\Lambda)$ dar. Dadurch schließt man die globalen Observablen (wie die Gesamtenergie und die Gesamtteilchenzahl) aus und beschränkt sich auf die sog. quasilokalen Observablen, die in der Normtopologie durch lokale Observablen approximiert werden können.

Mit dem C^* -Algebra-Ansatz in der statistischen Mechanik kann man nicht nur quantenmechanische Systeme (nicht-kommutative Algebren), sondern auch klassische Systeme (kommutative Algebren) beschreiben, so daß gemeinsame Strukturen besonders deutlich werden.

In Paragraph 9.1 führen wir die wichtigsten Begriffe der algebraischen Beschreibung unendlich großer Systeme ein. Da die Theorie der Gleichgewichtszustände unendlich großer Systeme noch nicht abgeschlossen ist, beschränken wir uns in dieser Arbeit auf translationsinvariante Gleichgewichtszustände, die wir in Paragraph 9.3 einführen. Mit einer in Paragraph 9.2 bewiesenen Supremumseigenschaft der verallgemeinerten spezifischen mikrokanonischen Entropie dehnen wir das Jaynessche Prinzip der maximalen Entropie auf unendlich große Systeme aus.

9.1 DIE ALGEBRAISCHE BESCHREIBUNG UNENDLICH GROSSER SYSTEME

Wir stützen uns bei dieser Einführung der Definitionen und Begriffe der algebraischen Beschreibung unendlich großer Systeme auf die Monographien von Ruelle [44] und Sakai [46]. Die grundlegende mathematische Struktur ist eine quasilokale C^* -Algebra.

Definition 9.1:

Sei $\mathfrak{A}$ eine C^* -Algebra und sei τ ein Homomorphismus von $\mathbb{Z}^V$ (als additive Gruppe) in die Gruppe der Automorphismen von $\mathfrak{A}$. Dann heißt das Tripel $(\mathfrak{A}, \mathbb{Z}^V, \tau)$ eine quasilokale C^* -Algebra, wenn eine Familie $\{\tilde{\mathfrak{A}}(\Lambda) : \Lambda \subset \mathbb{Z}^V\}$ von Subalgebren von $\mathfrak{A}$ derart existiert, daß gilt:

- (i) Ist $\Lambda_1 \subset \Lambda_2 \subset \mathbb{Z}^V$, dann ist $\tilde{\mathfrak{A}}(\Lambda_1) \subset \tilde{\mathfrak{A}}(\Lambda_2)$.
- (ii) Für alle $a \in \mathbb{Z}^V$ und alle $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ ist $\tau_a \tilde{\mathfrak{A}}(\Lambda) = \tilde{\mathfrak{A}}(\Lambda + a)$.
- (iii) Sind $\Lambda_1, \Lambda_2 \subset \mathbb{Z}^V$ mit $\Lambda_1 \cap \Lambda_2 = \emptyset$, dann ist $[\tilde{\mathfrak{A}}(\Lambda_1), \tilde{\mathfrak{A}}(\Lambda_2)] = 0$.
- (iv) $\bigcup_{\Lambda \subset \mathbb{Z}^V} \tilde{\mathfrak{A}}(\Lambda)$ liegt dicht in $\mathfrak{A}$.

Aus den Bedingungen (i), (ii) und (iii) folgt, daß eine quasilokale C^* -Algebra asymptotisch abelsch ist, d.h. für alle $A, B \in \mathfrak{A}$ gilt:

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \| [\tau_a A, B] \| = 0. \quad (9.1)$$

Wir zeigen nun, wie sich eine quasilokale C^* -Algebra zur Beschreibung eines unendlich großen Quantengittersystems aus den

lokalen, d.h. endlichen Quantengittersystemen aufbauen läßt. Der Vollständigkeit halber wiederholen wir dabei den Aufbau eines endlichen Quantengittersystems.

Jedem $x \in \mathbb{Z}^V$ ordnen wir die Kopie $\mathbb{H}_x$ eines festen K -dimensionalen Hilbertraumes $\mathbb{H}$ zu. Jedem $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ ordnen wir das Tensorprodukt

$$\mathbb{H}(\Lambda) := \bigotimes_{x \in \Lambda} \mathbb{H}_x \quad (9.2)$$

zu. Mit $\mathbb{H}(\Lambda)$ bezeichnen wir die C^* -Algebra aller beschränkten linearen Operatoren auf dem endlich-dimensionalen Hilbertraum

$\mathbb{H}(\Lambda)$. Da für alle $\Lambda_1 \subset \Lambda_2 \subset \mathbb{Z}^V$ $\mathbb{H}(\Lambda_2)$ isomorph zu $\mathbb{H}(\Lambda_1) \otimes \mathbb{H}(\Lambda_2 \setminus \Lambda_1)$ ist, existiert für alle $\Lambda_1 \subset \Lambda_2 \subset \mathbb{Z}^V$ ein injektiver $*$ -Homomorphismus

$$\alpha_{\Lambda_2 \Lambda_1} : A \mapsto A \otimes 1_{\Lambda_2 \setminus \Lambda_1} \quad (9.3)$$

von der C^* -Algebra $\mathbb{H}(\Lambda_1)$ in die C^* -Algebra $\mathbb{H}(\Lambda_2)$, der die beiden Bedingungen

$$\alpha_{\Lambda_2 \Lambda_1}(1_{\Lambda_1}) = 1_{\Lambda_2} \quad \text{und} \quad (9.4)$$

$$\alpha_{\Lambda_3 \Lambda_1} = \alpha_{\Lambda_3 \Lambda_2} \alpha_{\Lambda_2 \Lambda_1} \quad \text{für alle } \Lambda_1 \subset \Lambda_2 \subset \Lambda_3 \subset \mathbb{Z}^V \quad (9.5)$$

erfüllt. Damit ist ein induktives System von C^* -Algebren gegeben. Der induktive Limes existiert und wir bezeichnen diese C^* -Algebra mit $\mathbb{H}$, d.h. es existiert eine durch Mengeninklusion definierte gerichtete Menge $\{\tilde{\mathbb{H}}(\Lambda) : \Lambda \subset \mathbb{Z}^V\}$ von C^* -Subalgebren von $\mathbb{H}$, so daß gilt:

- (i) Ist $\Lambda_1 \subset \Lambda_2 \subset \mathbb{Z}^V$, dann ist $\tilde{H}(\Lambda_1) \subset \tilde{H}(\Lambda_2)$.
- (ii) Für alle $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ ist $\tilde{H}(\Lambda)$ *-isomorph zu $H(\Lambda)$.
- (iii) $\bigcup_{\Lambda \subset \mathbb{Z}^V} \tilde{H}(\Lambda)$ liegt dicht in H .

Da die Algebren $\tilde{H}(\Lambda)$, $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$, einfach und separabel sind, folgt mit (iii), daß H ebenfalls einfach und separabel ist. Aus der speziellen Konstruktion von H folgt weiter, daß H eine UHF-Algebra ist.

Die in (2.7) definierte unitäre Abbildung

$$V_{\Lambda}(a) : H(\Lambda) \longrightarrow H(\Lambda+a) \quad (9.6)$$

induziert einen *-Isomorphismus

$$\tau_a^{\Lambda} : H(\Lambda) \longrightarrow H(\Lambda+a), \quad (9.7)$$

der durch

$$\tau_a^{\Lambda} A = V_{\Lambda}(a) A V_{\Lambda+a}(-a) \quad (9.8)$$

gegeben ist. Die Menge aller *-Isomorphismen $\{\tau_a^{\Lambda} : \Lambda \subset \mathbb{Z}^V, a \in \mathbb{Z}^V\}$ definiert einen Homomorphismus τ von $\mathbb{Z}^V$ in die Gruppe der Automorphismen von H , so daß für alle $a \in \mathbb{Z}^V$ und alle $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ gilt:

$$\tau_a \tilde{H}(\Lambda) = \tilde{H}(\Lambda+a). \quad (9.9)$$

Trivialerweise gilt für alle $\Lambda_1, \Lambda_2 \subset \mathbb{Z}^V$ mit $\Lambda_1 \cap \Lambda_2 = \emptyset$

$$[\tilde{H}(\Lambda_1), \tilde{H}(\Lambda_2)] = 0, \quad (9.10)$$

womit die vier Bedingungen der Definition 9.1 erfüllt sind.

(H, Z^V, τ) ist also eine quasilokale C^* -Algebra.

Definition 9.2:

Ein positives lineares Funktional ω auf einer C^* -Algebra heißt ein Zustand, wenn $\|\omega\| = 1$ ist. (Hat die C^* -Algebra ein Element 1, dann ist $\|\omega\| = 1$ äquivalent zu $\omega(1) = 1$).

Welche Relation besteht nun zwischen den Zuständen auf der quasilokalen C^* -Algebra (H, Z^V, τ) und den lokalen Zuständen auf $H(\Lambda)$, $\Lambda \subset \subset Z^V$? Sei ω ein Zustand auf H . Die Restriktion von ω auf $\tilde{H}(\Lambda)$ ergibt einen Zustand ω_Λ auf $\tilde{H}(\Lambda)$ und damit auch auf $H(\Lambda)$. Da $H(\Lambda)$ endlich-dimensional ist, existiert eine eindeutige Zuordnung zwischen den normierten, positiven linearen Funktionalen ω_Λ auf $H(\Lambda)$ und den positiven linearen Operatoren W_Λ mit

$$\text{Tr}_{H(\Lambda)} W_\Lambda = 1, \quad (9.11)$$

so daß für alle $A \in H(\Lambda)$ gilt:

$$\omega_\Lambda(A) = \text{Tr}_{H(\Lambda)} W_\Lambda A. \quad (9.12)$$

Damit definiert ein Zustand ω auf H eine Familie von Dichteoperatoren $\{W_\Lambda : \Lambda \subset \subset Z^V\}$. Diese lokalen Zustände sind konsistent, d.h. wenn $\Lambda_1 \subset \Lambda_2$ ist, dann ist der Zustand ω_{Λ_1} die Restriktion des Zustands ω_{Λ_2} auf $H(\Lambda_1)$. Für die entsprechenden Dichteoperatoren gilt dann:

$$W_{\Lambda_1} = \text{Tr}_{H(\Lambda_2 \setminus \Lambda_1)} W_{\Lambda_2} \quad (9.13)$$

Umgekehrt, sei $\{W_{\Lambda} : \Lambda \subset \mathbb{Z}^V\}$ eine Familie konsistenter Dichteoperatoren. Jeder Operator W_{Λ} definiert einen Zustand

$$\omega_{\Lambda} : A \mapsto \text{Tr}_{H(\Lambda)} W_{\Lambda} A \quad (9.14)$$

auf $H(\Lambda)$ und damit auch auf $\tilde{H}(\Lambda)$. Ist $\Lambda_1 \subset \Lambda_2$, so folgt aus der Konsistenzbedingung für $A \in H(\Lambda)$:

$$\text{Tr}_{H(\Lambda_1)} W_{\Lambda_1} A = \text{Tr}_{H(\Lambda_2)} W_{\Lambda_2} A \otimes 1_{\Lambda_2 \setminus \Lambda_1} \quad (9.15)$$

Damit definiert die Familie $\{\omega_{\Lambda} : \Lambda \subset \mathbb{Z}^V\}$ auf der normierten $\ast$ -Algebra

$$\bigcup_{\Lambda \subset \mathbb{Z}^V} \tilde{H}(\Lambda) \quad (9.16)$$

ein positives lineares Funktional mit der Norm 1. Da die normierte $\ast$ -Algebra (9.16) in H dicht liegt, können wir dieses positive lineare Funktional eindeutig auf H fortsetzen.

Eine Familie konsistenter Dichteoperatoren $\{W_{\Lambda} : \Lambda \subset \mathbb{Z}^V\}$ definiert also eindeutig einen Zustand ω auf H ; umgekehrt definiert ein Zustand ω auf H eine Familie konsistenter Dichteoperatoren $\{W_{\Lambda} : \Lambda \subset \mathbb{Z}^V\}$.

Ein Zustand ω auf H heißt translationsinvariant, wenn für alle $A \in H$ und alle $a \in \mathbb{Z}^V$ gilt:

$$\omega(\tau_a A) = \omega(A) \quad (9.17)$$

Eine Familie konsistenter Dichteoperatoren $\{w_\Lambda : \Lambda \subset \mathbb{Z}^V\}$ definiert dann und nur dann einen translationsinvarianten Zustand auf $\mathcal{H}$, wenn für alle $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ und alle $a \in \mathbb{Z}^V$

$$w_{\Lambda+a} = V_\Lambda(a) w_\Lambda V_{\Lambda+a}(-a) \quad (9.18)$$

ist, wobei $V_\Lambda(a)$ durch (2.7) definiert wurde.

Die Menge E der translationsinvarianten Zustände auf der C^* -Algebra $\mathcal{H}$ ist konvex und in der schwachen $*$ -Topologie kompakt. Ein Zustand ω heißt nach Ruelle [44] ergodisch, wenn er Extrempunkt der Menge E ist, d.h. wenn er nicht in der Form

$$\omega = \alpha \omega_1 + (1-\alpha) \omega_2 \quad (9.19)$$

mit $\omega_1, \omega_2 \in E$, $\omega_1 \neq \omega_2$, $\alpha \in (0,1)$ geschrieben werden kann. Die Menge der Extrempunkte von E bezeichnen wir mit $\mathcal{E}(E)$. Sei ω ein translationsinvarianter Zustand auf $\mathcal{H}$, den wir als Gleichgewichtszustand eines unendlich großen Quantengittersystems interpretieren können (siehe dazu Paragraph 9.3). Dann beschreibt ω , wie Ruelle [44] gezeigt hat, dann und nur dann eine reine thermodynamische Phase, wenn ω ergodisch ist.

Da $\mathcal{H}$ eine separable UHF-Algebra ist, besitzt jeder translationsinvariante Zustand ω eine eindeutige Zerlegung in ergodische Zustände,

$$\omega = \int_{\mathcal{E}(E)} \sigma \, d\mu_\omega(\sigma) \quad , \quad (9.20)$$

wobei der Träger des Wahrscheinlichkeitsmaßes μ_ω die ergodischen Zustände sind. Mit der Interpretation von Ruelle läßt sich damit

jeder translationsinvariante Gleichgewichtszustand eindeutig in Zustände zerlegen, die reine thermodynamische Phasen repräsentieren.

Ausgehend von der Entropie der lokalen Zustände, führen wir als nächstes den Begriff der mittleren Entropie eines translationsinvarianten Zustands eines unendlich großen Systems ein.

Definition 9.3:

Sei $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ und sei $W_\Lambda \in \mathcal{H}(\Lambda)$ ein Dichteoperator. Dann definieren wir die Entropie des lokalen Zustands W_Λ durch

$$S(W_\Lambda) := - \operatorname{Tr}_{\mathcal{H}(\Lambda)} (W_\Lambda \log W_\Lambda) . \quad (9.21)$$

Satz 9.4 [44]:

$$a) \quad 0 \leq S(W_\Lambda) \leq n(\Lambda) \log K . \quad (9.22)$$

b) Seien $\Lambda_1, \Lambda_2 \subset \mathbb{Z}^V$ mit $\Lambda_1 \cap \Lambda_2 = \emptyset$. Sei W_{Λ_1} bzw. W_{Λ_2} die Restriktion von $W_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2}$ auf $\mathcal{H}(\Lambda_1)$ bzw. $\mathcal{H}(\Lambda_2)$. Dann gilt:

$$S(W_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2}) \leq S(W_{\Lambda_1}) + S(W_{\Lambda_2}) . \quad (9.23)$$

Da jeder Zustand w auf $\mathcal{H}$ eindeutig eine Familie konsistenter Dichteoperatoren $\{W_\Lambda : \Lambda \subset \mathbb{Z}^V\}$ definiert und umgekehrt, liegt es nahe, den thermodynamischen Limes der Entropie pro Gitterpunkt,

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\Lambda)} S(W_\Lambda) , \quad (9.24)$$

als die Entropie von ω zu definieren. Das Problem besteht darin, die Existenz des thermodynamischen Limes zu zeigen. Bisher ist es nur möglich, die Existenz für translationsinvariante und periodische Zustände zu beweisen, und zwar lediglich für Folgen, die wie Parallelepipede unendlich groß werden.

Satz 9.5 [44]:

Sei ω ein translationsinvarianter Zustand auf der quasilokalen C^* -Algebra (A, Z^V, τ) und sei $\{w_\Lambda : \Lambda \subset Z^V\}$ die entsprechende Familie konsistenter Dichteoperatoren. Dann existiert der Limes

$$s(\omega) := \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{S(w_\Lambda(a))}{n(a)} = \inf_{a \in \mathbb{N}^V} \frac{S(w_\Lambda(a))}{n(a)} \quad (9.25)$$

und es gilt:

$$a) \quad 0 \leq s(\omega) \leq \log K \quad (9.26)$$

b) $s(\omega)$ ist auf E affin, d.h. für $\alpha \in [0,1]$ ist

$$s(\alpha \omega_1 + (1-\alpha) \omega_2) = \alpha s(\omega_1) + (1-\alpha) s(\omega_2) \quad (9.27)$$

c) $s(\omega)$ ist auf E halbstetig von oben in der schwachen $*$ -Topologie.

Definition 9.6:

$s(\omega)$ heißt die mittlere Entropie des translationsinvarianten Zustands .

Da wir Gleichgewichtszustände durch ein Supremumsprinzip bezüglich der mittleren Entropie charakterisieren (siehe Paragraph 9.3), ist die schwache $*$ -Topologie für unsere Zwecke die geeignete Topologie auf E . Zwar ist $s(\omega)$ in der Normtopologie auf

E stetig, jedoch ist diese Topologie zu fein für uns. So ist E in der schwachen * -Topologie, nicht aber in der Normtopologie, kompakt. Da $s(\omega)$ in der schwachen * -Topologie halbstetig von oben ist, nimmt somit $s(\omega)$ auf jeder abgeschlossenen Teilmenge von E sein Supremum an.

Mit (9.20) können wir jeden Zustand $\omega \in E$ eindeutig als Integral über ergodische Zustände darstellen:

$$\omega = \int_{E(E)} \sigma \, d\mu_{\omega}(\sigma) \quad . \quad (9.28)$$

Da $s(\omega)$ auf E affin und halbstetig von oben ist, gilt dann:

$$s(\omega) = \int_{E(E)} s(\sigma) \, d\mu_{\omega}(\sigma) \quad . \quad (9.29)$$

Wie wir schon erwähnten, kann die Existenz des thermodynamischen Limes der Entropie pro Gitterpunkt nicht nur für $\mathbb{Z}^V$ -invariante Zustände gezeigt werden, sondern sogar für periodische Zustände, d.h. für Zustände, die bezüglich einer Untergruppe von $\mathbb{Z}^V$ invariant sind. Für jede natürliche Zahl $m \in \mathbb{N}$ definieren wir:

$$E_m = \{ \omega \in \mathcal{R}^* : \|\omega\| = 1, \omega(A) = \omega(\tau_{ma}A), A \in \mathcal{R}, a \in \mathbb{Z}^V \}. \quad (9.30)$$

Dabei ist $\mathcal{R}^*$ der Dualraum von $\mathcal{R}$ und $ma = (ma_1, \dots, ma_V) \in \mathbb{Z}^V$.

Satz 9.7 [37]:

Sei $\omega \in E_m$ und sei $\{W_{\Lambda} : \Lambda \subset \mathbb{Z}^V\}$ die entsprechende Familie konsistenter Dichteoperatoren. Dann existiert der Limes

$$s(\omega) := \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{S(W_{\Lambda(ma)})}{n(ma)} = \inf_{a \in \mathbb{N}^V} \frac{S(W_{\Lambda(ma)})}{n(ma)} \quad (9.31)$$

und es gilt:

$$a) \quad 0 \leq s(\omega) \leq \log K \quad . \quad (9.32)$$

b) $s(\omega)$ ist auf E_m affin.

c) $s(\omega)$ ist auf E_m halbstetig von oben in der schwachen $*$ -Topologie.

Sei $\bar{\omega} \in E_m$. Dann definieren wir einen translationsinvarianten Zustand $\omega \in E_1 = E$ durch

$$\omega = \frac{1}{m^V} \sum_{x \in \Lambda(m)} \tau_x^* \bar{\omega} \quad , \quad (9.33)$$

wobei $e = (1, \dots, 1) \in \mathbb{Z}^V$ ist und τ_x^* durch

$$(\tau_x^* \bar{\omega})(A) = \bar{\omega}(\tau_x A) \quad , \quad A \in \mathcal{R} \quad , \quad (9.34)$$

definiert ist. Aus der Affinität von $s(\omega)$ auf E_m folgt dann :

$$s(\omega) = s(\bar{\omega}) \quad . \quad (9.35)$$

Der Begriff des Potentials, den wir für endliche Systeme definiert haben (Definition 2.1), überträgt sich unmittelbar auf unendlich große Systeme. Da für alle $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ $\mathcal{R}(\Lambda)$ $*$ -isomorph zu $\mathcal{R}(\Lambda)$ ist, überträgt sich ebenfalls der Begriff des Potentials mit Vakuumzustand (Definition 2.5).

Für jedes $\theta \in \mathcal{B}$ definieren wir ein $A_\theta \in \mathcal{R}$ durch

$$A_\theta := \sum_{x \geq 0} \frac{\theta(x)}{n(x)} \quad . \quad (9.36)$$

A_Θ können wir als den Beitrag des Ursprungs $0 = (0, \dots, 0) \in \mathbb{Z}^V$ zur Gesamtwechselwirkung betrachten. Sei $\Theta \in \mathbb{B}$ und sei $\{\Lambda_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die im Sinne von van Hove unendlich groß wird. Dann gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left\| \frac{U_\Theta(\Lambda_k)}{n(\Lambda_k)} - \frac{1}{n(\Lambda_k)} \sum_{x \in \Lambda_k} \tau_x A_\Theta \right\| = 0 \quad . \quad (9.37)$$

Damit gilt für alle translationsinvarianten Zustände $\omega \in E$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\Lambda_k)} \omega(U_\Theta(\Lambda_k)) = \omega(A_\Theta) \quad , \quad (9.38)$$

und $\omega(A_\Theta)$ kann als der mittlere Wert der Observablen $U_\Theta(\Lambda)$ pro Gitterpunkt betrachtet werden.

Die zu A_Θ analoge Größe des Teilchenzahloperators (Definition 2.7.a) ist mit (2.41) $N(\{0\})$.

9.2 DAS MAXIMUM DER MITTLEREN ENTROPIE UNTER NEBENBEDINGUNGEN

In dieser Arbeit haben wir drei verschiedene Entropiebegriffe eingeführt, nämlich die mikrokanonische Entropie, die verallgemeinerte spezifische mikrokanonische Entropie und die mittlere Entropie eines translationsinvarianten Zustands eines unendlich großen Systems. Mit Satz 4.30 besitzen wir eine Beziehung zwischen der spezifischen mikrokanonischen Entropie und der verallgemeinerten spezifischen mikrokanonischen Entropie. Um eine Relation zwischen der mittleren Entropie eines translationsinvarianten Zustands eines unendlich großen Systems und der verallge-

meinerten spezifischen mikrokanonischen Entropie herleiten zu können, müssen wir letztere leicht modifizieren.

In den letzten Kapiteln bereitete uns schon die Unkenntnis von $\hat{s}(\rho, \Phi, \Psi, x, y)$ am Rand von $\hat{E}(\Phi, \Psi) = \{(\rho, x, y) : \hat{s}(\rho, \Phi, \Psi, x, y) > -\infty\}$ einige Unannehmlichkeiten. Die modifizierte verallgemeinerte spezifische mikrokanonische Entropie $\hat{s}_m(\rho, \Phi, \Psi, x, y)$ ist mit der verallgemeinerten spezifischen mikrokanonischen Entropie $\hat{s}(\rho, \Phi, \Psi, x, y)$ auf dem Innern von $\hat{E}(\Phi, \Psi)$ identisch. In denjenigen Randpunkten (ρ_0, x_0, y_0) von $\hat{E}(\Phi, \Psi)$, für die

$$\limsup_{(\rho, x, y) \rightarrow (\rho_0, x_0, y_0)} \hat{s}(\rho, \Phi, \Psi, x, y) \quad (9.39)$$

endlich ist, definieren wir:

$$\hat{s}_m(\rho_0, \Phi, \Psi, x_0, y_0) := \limsup_{(\rho, x, y) \rightarrow (\rho_0, x_0, y_0)} \hat{s}(\rho, \Phi, \Psi, x, y) \quad (9.40)$$

Für alle

$$(\rho_0, x_0, y_0) \in \mathbb{R}^3 \setminus \{(\rho, x, y) : \limsup_{(\rho', x', y') \rightarrow (\rho, x, y)} \hat{s}(\rho', \Phi, \Psi, x', y') > -\infty\}$$

definieren wir:

$$\hat{s}_m(\rho_0, \Phi, \Psi, x_0, y_0) := -\infty \quad (9.41)$$

Damit ist $\hat{E}_m(\Phi, \Psi) := \{(\rho, x, y) : \hat{s}_m(\rho, \Phi, \Psi, x, y) > -\infty\}$ konvex und $\hat{s}_m(\rho, \Phi, \Psi, x, y)$ ist auf $\mathbb{R}^3$ in (ρ, x, y) halbstetig von oben⁺.

⁺Die gleiche Funktion $\hat{s}_m(\rho, \Phi, \Psi, x, y)$ erhalten wir, wenn wir in unserem Aufbau anstelle des mikrokanonischen Ensembles (2.53) mit fester Teilchenzahl ein modifiziertes mikrokanonisches Ensemble nehmen, bei dem die Teilchendichte in einem offenen Intervall variieren kann.

Satz 9.8:

Seien $\Phi, \Psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\chi^\Phi = \chi^\Psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a))U_\Phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a))U_\Psi(\Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Für alle $\Lambda \subset \subset \mathbb{Z}^V$ sei $[U_\Phi(\Lambda), U_\Psi(\Lambda)] = 0$. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \sup \{ s(\omega) : \omega \in E, \omega(N(\{O\})) = \rho, \omega(A_\Phi) = x, \omega(A_\Psi) = y \} \\ = \hat{s}_m(\rho, \Phi, \Psi, x, y) . \end{aligned} \quad (9.42)$$

Ist $(\rho, x, y) \in \text{int}\{(\rho, x, y) : \hat{s}_m(\rho, \Phi, \Psi, x, y) > -\infty\}$, dann existiert mindestens ein Zustand $\omega \in E$ mit $\omega(N(\{O\})) = \rho$, $\omega(A_\Phi) = x$ und $\omega(A_\Psi) = y$, so daß gilt:

$$s(\omega) = \hat{s}_m(\rho, \Phi, \Psi, x, y) . \quad (9.43)$$

Beweis: Der Beweis erfolgt in zwei Schritten. Zuerst zeigen wir, daß für alle $\omega \in E$ gilt:

$$s(\omega) \leq \hat{s}_m(\omega(N(\{O\})), \Phi, \Psi, \omega(A_\Phi), \omega(A_\Psi)) . \quad (9.44)$$

Danach konstruieren wir für ein beliebiges $(\rho, x, y) \in \text{int } \hat{E}_m(\Phi, \Psi)$ einen Zustand $\omega \in E$ mit $\omega(N(\{O\})) = \rho$, $\omega(A_\Phi) = x$ und $\omega(A_\Psi) = y$, so daß gilt:

$$s(\omega) = \hat{s}_m(\rho, \Phi, \Psi, x, y) . \quad (9.45)$$

a) Zunächst beweisen wir (9.44) für ergodische Zustände. Dazu führen wir für offene Intervalle $I_i \subset \mathbb{R}$, $i=1,2,3$, die folgenden Bezeichnungen ein:

$$P\left(\frac{1}{n(\Lambda)} n \in I_1\right) := \sum_{\frac{1}{n(\Lambda)} n \in I_1} P(n, \Lambda) \quad . \quad (9.46)$$

$$P\left(\frac{1}{n(\Lambda)} \lambda_i^\wedge \in I_2\right) := \sum_{\frac{1}{n(\Lambda)} \lambda_i^\wedge \in I_2} P(\lambda_i^\wedge) \quad . \quad (9.47)$$

$$P\left(\frac{1}{n(\Lambda)} \alpha_j^\wedge \in I_3\right) := \sum_{\frac{1}{n(\Lambda)} \alpha_j^\wedge \in I_3} P(\alpha_j^\wedge) \quad . \quad (9.48)$$

Sei $\{\wedge_k\}$ eine Folge endlicher Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$, die wie Parallelepipede unendlich groß wird. Sei $\omega \in \mathcal{E}(E)$ und sei $\{\omega_\wedge : \wedge \subset \subset \mathbb{Z}^V\}$ bzw. $\{\omega_\wedge : \wedge \subset \subset \mathbb{Z}^V\}$ die entsprechende Familie konsistenter Dichteoperatoren bzw. lokaler Zustände. Seien $I_i \subset \mathbb{R}$, $i=1,2,3$, offene Intervalle mit $\omega(N(\{0\})) \in I_1$, $\omega(A_\phi) \in I_2$ und $\omega(A_\psi) \in I_3$ derart, daß entweder der Abstand von $I_1 \times I_2 \times I_3$ zu $\hat{E}_m(\Phi, \Psi)$ größer als Null ist, oder $(I_1 \times I_2 \times I_3) \cap \text{int } \hat{E}_m(\Phi, \Psi) \neq \emptyset$ ist.

Da $U_\phi(\wedge)$, $U_\psi(\wedge)$ und $N(\wedge)$ für alle $\wedge \subset \subset \mathbb{Z}^V$ paarweise kommutieren, und da jeder lokale Zustand $\omega_\wedge$ auf den Spektren von $U_\phi(\wedge)$, $U_\psi(\wedge)$ und $N(\wedge)$ ein Wahrscheinlichkeitsmaß induziert, können wir in Analogie zum klassischen Fall [27] schließen, daß gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \omega_{\wedge_k} \left(P\left(\frac{n}{n(\wedge_k)} \in I_1\right) P\left(\frac{1}{n(\wedge_k)} \lambda_i^{\wedge_k} \in I_2\right) P\left(\frac{1}{n(\wedge_k)} \alpha_j^{\wedge_k} \in I_3\right) \right) = 1 \quad . \quad (9.49)$$

Nehmen wir in der Ungleichungskette

$$\begin{aligned}
 & \sup_{\frac{n}{n(\wedge_k)} \in I_1} \text{Tr}_{H(\wedge_k)} P(n, \wedge_k) P\left(\frac{\lambda_i^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} \in I_2\right) P\left(\frac{\alpha_j^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} \in I_3\right) \\
 & \equiv \text{Tr}_{H(\wedge_k)} P\left(\frac{n}{n(\wedge_k)} \in I_1\right) P\left(\frac{\lambda_i^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} \in I_2\right) P\left(\frac{\alpha_j^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} \in I_3\right) \\
 & \equiv n(\wedge_k) \sup_{\frac{n}{n(\wedge_k)} \in I_1} \text{Tr}_{H(\wedge_k)} P(n, \wedge_k) P\left(\frac{\lambda_i^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} \in I_2\right) P\left(\frac{\alpha_j^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} \in I_3\right) \quad (9.50)
 \end{aligned}$$

den Logarithmus, dividieren durch $n(\wedge_k)$ und betrachten den Limes $k \rightarrow \infty$, so erhalten wir nach Satz 4.27.g :

$$\begin{aligned}
 & \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\wedge_k)} \log \text{Tr}_{H(\wedge_k)} P\left(\frac{n}{n(\wedge_k)} \in I_1\right) P\left(\frac{\lambda_i^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} \in I_2\right) P\left(\frac{\alpha_j^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} \in I_3\right) \\
 & = \sup_{(\rho, x, y) \in I_1 \times I_2 \times I_3} \hat{s}_m(\rho, \phi, \psi, x, y) \quad . \quad (9.51)
 \end{aligned}$$

Sei

$$\{ \varphi_i^{\wedge_k} : i=1, \dots, \dim H(\wedge_k) \} \quad (9.52)$$

eine gemeinsame Eigenbasis von $U_\phi(\wedge_k)$, $U_\psi(\wedge_k)$ und $N(\wedge_k)$. Seien

$$Q_k := P\left(\frac{n}{n(\wedge_k)} \in I_1\right) P\left(\frac{\lambda_i^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} \in I_2\right) P\left(\frac{\alpha_j^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} \in I_3\right) \quad , \quad (9.53)$$

$$F_k := \{ \varphi_i^{\wedge_k} : 1 \leq i \leq \dim H(\wedge_k), Q_k \varphi_i^{\wedge_k} = \varphi_i^{\wedge_k} \} \quad . \quad (9.54)$$

Da für jede Orthonormalbasis $\{ \psi_j : j=1, \dots, \dim H \}$ und jeden Dichteoperator eines separablen Hilbertraumes H

$$- \operatorname{Tr}_H W \log W \cong - \sum_j (\psi_j, W \psi_j) \log (\psi_j, W \psi_j) \quad (9.55)$$

ist, gilt für alle $k \in \mathbb{N}$:

$$\begin{aligned} S(W_{\wedge_k}) &\cong - \sum_i (\varphi_i^{\wedge_k}, W_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k}) \log (\varphi_i^{\wedge_k}, W_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k}) \\ &= - \sum_{\varphi_i^{\wedge_k} \in F_k} (\varphi_i^{\wedge_k}, W_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k}) \log (\varphi_i^{\wedge_k}, W_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k}) \\ &\quad - \sum_{\varphi_i^{\wedge_k} \notin F_k} (\varphi_i^{\wedge_k}, W_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k}) \log (\varphi_i^{\wedge_k}, W_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k}) . \end{aligned} \quad (9.56)$$

Sei

$$\alpha_i^k := \frac{(\varphi_i^{\wedge_k}, W_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k})}{\omega_{\wedge_k}(Q_k)} . \quad (9.57)$$

Da

$$\omega_{\wedge_k}(Q_k) = \sum_{\varphi_i^{\wedge_k} \in F_k} (\varphi_i^{\wedge_k}, W_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k}) \quad (9.58)$$

ist, folgt aus der Konkavität der Logarithmusfunktion:

$$\begin{aligned} &- \sum_{\varphi_i^{\wedge_k} \in F_k} (\varphi_i^{\wedge_k}, W_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k}) \log (\varphi_i^{\wedge_k}, W_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k}) \\ &= - \omega_{\wedge_k}(Q_k) \sum_{\varphi_i^{\wedge_k} \in F_k} \alpha_i^k \log (\varphi_i^{\wedge_k}, W_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \equiv \omega_{\wedge_k}(Q_k) \log \sum_{\varphi_i^{\wedge_k} \in F_k} \frac{\alpha_i^k}{(\varphi_i^{\wedge_k}, w_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k})} \\
 & = \omega_{\wedge_k}(Q_k) \log \frac{\text{Tr}_{H(\wedge_k)} Q_k}{\omega_{\wedge_k}(Q_k)} . \quad (9.59)
 \end{aligned}$$

Analog erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{\varphi_i^{\wedge_k} \notin F_k} (\varphi_i^{\wedge_k}, w_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k}) \log (\varphi_i^{\wedge_k}, w_{\wedge_k} \varphi_i^{\wedge_k}) \\
 & \equiv (1 - \omega_{\wedge_k}(Q_k)) \log \frac{K^{n(\wedge_k)} - \text{Tr}_{H(\wedge_k)}}{1 - \omega_{\wedge_k}(Q_k)} , \quad (9.60)
 \end{aligned}$$

wobei $K = \dim H_x$ für alle $x \in \mathbb{Z}^V$ ist. Damit gilt:

$$\begin{aligned}
 S(W_{\wedge_k}) & \equiv - \omega_{\wedge_k}(Q_k) \log \omega_{\wedge_k}(Q_k) - (1 - \omega_{\wedge_k}(Q_k)) \log (1 - \omega_{\wedge_k}(Q_k)) \\
 & \quad + \omega_{\wedge_k}(Q_k) \log \text{Tr}_{H(\wedge_k)} Q_k + (1 - \omega_{\wedge_k}(Q_k)) \log K^{n(\wedge_k)} . \quad (9.61)
 \end{aligned}$$

Dividieren wir nun durch $n(\wedge_k)$ und betrachten den Limes $k \rightarrow \infty$, so erhalten wir mit (9.49) und (9.51) :

$$\begin{aligned}
 s(\omega) & = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{n(\wedge_k)} S(W_{\wedge_k}) \\
 & \equiv \sup_{(\rho, x, y) \in I_1 \times I_2 \times I_3} \hat{s}_m(\rho, \phi, \Psi, x, y) . \quad (9.62)
 \end{aligned}$$

Da die Ungleichung (9.62) für alle offenen Intervalle I_1, I_2, I_3 gilt, für die entweder der Abstand von $I_1 \times I_2 \times I_3$ zu $\hat{E}_m(\Phi, \Psi)$ größer als Null oder $(I_1 \times I_2 \times I_3) \cap \text{int } \hat{E}_m(\Phi, \Psi) \neq \emptyset$ ist, und da laut Voraussetzung

$$(\omega(N(\{O\})), \omega(A_\Phi), \omega(A_\Psi)) \in I_1 \times I_2 \times I_3 \quad (9.63)$$

ist, folgt mit der Halbstetigkeit von oben von $\hat{s}_m(\Phi, \Psi, \omega, x, y)$:

$$s(\omega) \leq \hat{s}_m(\omega(N(\{O\})), \Phi, \Psi, \omega(A_\Phi), \omega(A_\Psi)) \quad (9.64)$$

Wir müssen nun noch die Ungleichung (9.64) für ein beliebiges $\omega \in E$ zeigen. Die Abbildung

$$E \ni \omega \mapsto \hat{s}_m(\omega(N(\{O\})), \Phi, \Psi, \omega(A_\Phi), \omega(A_\Psi)) \quad (9.65)$$

ist konkav und in der schwachen $*$ -Topologie halbstetig von oben. Nun kann jede konkave, von oben halbstetige Funktion von oben durch stetige affine Funktionen approximiert werden [27]; d.h. zu jedem Zustand $\omega_0 \in E$ und zu jedem $\varepsilon > 0$ existiert eine affine, in der schwachen $*$ -Topologie auf E stetige Funktion $h(\omega)$, so daß gilt:

$$h(\omega) \geq \hat{s}_m(\omega(N(\{O\})), \Phi, \Psi, \omega(A_\Phi), \omega(A_\Psi)) \quad \text{für alle} \quad (9.66) \\ \omega \in E.$$

$$h(\omega_0) \geq \hat{s}_m(\omega_0(N(\{O\})), \Phi, \Psi, \omega_0(A_\Phi), \omega_0(A_\Psi)) + \varepsilon \quad (9.67)$$

Da $s(\omega)$ auf E affin und in der schwachen $*$ -Topologie halbstetig

von oben ist, ist $(s(\omega) - h(\omega))$ ebenfalls affin und halbstetig von oben. Damit nimmt $(s(\omega) - h(\omega))$ sein Supremum über alle $\omega \in E$ auf der Menge $\varepsilon(E)$ der Extrempunkte von E an. Nun ist für alle ergodischen Zustände $\omega_e \in \varepsilon(E)$

$$h(\omega_e) \cong \hat{s}_m(\omega_e(N(\{O\})), \phi, \psi, \omega_e(A_\phi), \omega_e(A_\psi)) \cong s(\omega_e), \quad (9.68)$$

womit das Supremum nicht positiv ist, d.h. für alle $\omega \in E$ ist

$$s(\omega) \cong h(\omega). \quad (9.69)$$

Also gilt:

$$\begin{aligned} s(\omega_o) &\cong h(\omega_o) \\ &\cong \hat{s}_m(\omega_o(N(\{O\})), \phi, \psi, \omega_o(A_\phi), \omega_o(A_\psi)) + \varepsilon. \end{aligned} \quad (9.70)$$

Da (9.70) für alle $\varepsilon > 0$ gilt, und da $\omega_o \in E$ beliebig war, gilt somit für alle $\omega \in E$:

$$s(\omega) \cong \hat{s}_m(\omega(N(\{O\})), \phi, \psi, \omega(A_\phi), \omega(A_\psi)). \quad (9.71)$$

b) Im zweiten Teil des Beweises konstruieren wir einen Zustand $\omega \in E$ mit

$$s(\omega) = \hat{s}_m(\omega(N(\{O\})), \phi, \psi, \omega(A_\phi), \omega(A_\psi)). \quad (9.72)$$

Sei $(p, x, y) \in \text{int } \hat{E}_m(\phi, \psi)$. Mit Satz 4.27 existiert eine wie Parallelepipede unendlich groß werdende Folge $\{\wedge_k\}$ endlicher

Teilmengen von $\mathbb{Z}^V$ derart, daß für alle $k \in \mathbb{N}$ gilt:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{n(\wedge_k)} \log \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} P\left(\left|\frac{n}{n(\wedge_k)} - \rho\right| < \frac{1}{k}\right) P\left(\left|\frac{\lambda_i^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} - x\right| < \frac{1}{k}\right) P\left(\left|\frac{\alpha_j^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} - y\right| < \frac{1}{k}\right) \\ & \geq \hat{s}_m(\rho, \phi, \psi, x, y) - \frac{1}{k} \quad . \end{aligned} \quad (9.73)$$

Sei

$$W_{\wedge_k} := \frac{P\left(\left|\frac{n}{n(\wedge_k)} - \rho\right| < \frac{1}{k}\right) P\left(\left|\frac{\lambda_i^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} - x\right| < \frac{1}{k}\right) P\left(\left|\frac{\alpha_j^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} - y\right| < \frac{1}{k}\right)}{\text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} P\left(\left|\frac{n}{n(\wedge_k)} - \rho\right| < \frac{1}{k}\right) P\left(\left|\frac{\lambda_i^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} - x\right| < \frac{1}{k}\right) P\left(\left|\frac{\alpha_j^{\wedge_k}}{n(\wedge_k)} - y\right| < \frac{1}{k}\right)} \quad (9.74)$$

Dann gilt mit (9.73) :

$$S(W_{\wedge_k}) \geq n(\wedge_k) \left(\hat{s}_m(\rho, \phi, \psi, x, y) - \frac{1}{k} \right) \quad . \quad (9.75)$$

Sei G_k eine Untergruppe der additiven Gruppe $\mathbb{Z}^V$ derart, daß

$$\{ \wedge_k + a : a \in G_k \} \quad (9.76)$$

eine disjunkte Zerlegung von $\mathbb{Z}^V$ ist. Für jedes $T \subset G_k$ definieren wir auf

$$\mathbb{H}\left(\bigcup_{a \in T} \wedge_k + a\right) \quad (9.77)$$

einen Dichteoperator

$$W_{\wedge_k}^T := \bigotimes_{a \in T} W_{\wedge_k + a} \quad , \quad (9.78)$$

wobei

$$W_{\wedge_k + a} = V_{\wedge_k}(a) W_{\wedge_k} V_{\wedge_k + a}(-a) \quad (9.79)$$

ist. Die Familie $\{ W_{\wedge_k}^T : T \subset G_k \}$ definiert nun einen Zustand $\bar{\omega}_k$ auf $\mathbb{H}$ [37]. Dieser Zustand $\bar{\omega}_k$ ist invariant unter G_k , womit seine mittlere Entropie $s(\bar{\omega}_k)$ existiert. Aus der speziellen Konstruktion von $W_{\wedge_k}^T$ folgt:

$$s(\wedge_k) = \frac{1}{n(\wedge_k)} S(W_{\wedge_k}) \cong \hat{s}_m(\rho, \phi, \psi, x, y) - \frac{1}{k} . \quad (9.80)$$

Wir mitteln nun $\bar{\omega}_k$ über die endliche Faktorgruppe $\mathbb{Z}^V / G_k$ und erhalten dadurch einen translationsinvarianten Zustand $\omega_k \in E$. Mit (9.35) und (9.80) ist

$$s(\omega_k) = s(\bar{\omega}_k) \cong \hat{s}_m(\rho, \phi, \psi, x, y) - \frac{1}{k} . \quad (9.81)$$

Nach Konstruktion gilt für alle $k \in \mathbb{N}$:

$$\left| \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} W_{\wedge_k} \frac{1}{n(\wedge_k)} N(\wedge_k) - \rho \right| \leq \frac{1}{k} . \quad (9.82)$$

$$\left| \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} W_{\wedge_k} \frac{1}{n(\wedge_k)} U_\phi(\wedge_k) - x \right| \leq \frac{1}{k} . \quad (9.83)$$

$$\left| \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} W_{\wedge_k} \frac{1}{n(\wedge_k)} U_\psi(\wedge_k) - y \right| \leq \frac{1}{k} . \quad (9.84)$$

Da ferner

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \omega_k(N(\{0\})) - \text{Tr}_{\mathbb{H}(\wedge_k)} W_{\wedge_k} \frac{1}{n(\wedge_k)} N(\wedge_k) \right| = 0 , \quad (9.85)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \omega_k(A_\Phi) - \text{Tr}_{\mathcal{H}(\wedge_k)} W_{\wedge_k} \frac{1}{n(\wedge_k)} U_\Phi(\wedge_k) \right| = 0, \quad (9.86)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \omega_k(A_\Psi) - \text{Tr}_{\mathcal{H}(\wedge_k)} W_{\wedge_k} \frac{1}{n(\wedge_k)} U_\Psi(\wedge_k) \right| = 0 \quad (9.87)$$

ist, erhalten wir:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \omega_k(N(\{O\})) = \rho. \quad (9.88)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \omega_k(A_\Phi) = x. \quad (9.89)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \omega_k(A_\Psi) = y. \quad (9.90)$$

Sei nun ω der Limes einer in der schwachen *-Topologie konvergenten Teilfolge von $\{\omega_k\}$. Dann ist $\omega(A_\Phi) = x$, $\omega(A_\Psi) = y$, $\omega(N(\{O\})) = \rho$, und aus der Halbstetigkeit von oben der mittleren Entropie folgt:

$$s(\omega) \cong \limsup_{k \rightarrow \infty} s(\omega_k) \cong \hat{s}_m(\rho, \Phi, \Psi, x, y). \quad (9.91)$$

Q.E.D.

Definieren wir die modifizierte spezifische mikrokanonische Entropie $\hat{s}_m(\rho, \Phi, x)$ analog zur modifizierten verallgemeinerten spezifischen mikrokanonischen Entropie, so erhalten wir aus Satz 9.8 unmittelbar eine Relation zwischen der modifizierten spezifischen mikrokanonischen Entropie und der mittleren Entropie eines translationsinvarianten Zustands eines unendlich großen Systems.

Korollar 9.9:

Sei $\Phi \in B_{\text{vac}}$. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \sup \{ s(\omega) : \omega \in E, \omega(N(\{0\})) = \rho, \omega(A_\Phi) = x \} \\ = \hat{s}_m(\rho, \Phi, x) . \end{aligned} \quad (9.92)$$

Ist $(\rho, x) \in \text{int} \{ (\rho, x) : \hat{s}_m(\rho, \Phi, x) > -\infty \}$, dann existiert mindestens ein Zustand $\omega \in E$ mit $\omega(N(\{0\})) = \rho$ und $\omega(A_\Phi) = x$, so daß gilt:

$$s(\omega) = \hat{s}_m(\rho, \Phi, x) . \quad (9.93)$$

9.3 TRANSLATIONSINVARIANTE GLEICHGEWICHTSZUSTÄNDE UNENDLICH
GROSSER QUANTENGITTERSYSTEME

Zum Abschluß dieser Arbeit gehen wir kurz auf die Theorie der translationsinvarianten Gleichgewichtszustände unendlich großer Quantengittersysteme ein. Da das großkanonische Ensemble einen Gleichgewichtszustand eines endlichen Systems beschreibt, definiert man einen Gleichgewichtszustand eines unendlich großen Systems als den thermodynamischen Limes der entsprechenden lokalen großkanonischen Ensembles. (Man nimmt speziell das großkanonische Ensemble, da es mathematisch am einfachsten zu behandeln ist.) Dieser Grenzwert ist allerdings in manchen Fällen (Phasenübergänge) nicht eindeutig, so daß man eine allgemeinere Definition benötigt. Es sind bis heute drei äquivalente Bedingungen bekannt, die translationsinvariante Gleichgewichtszustände charakteri-

sieren, nämlich die KMS-Bedingung [44], die Gibbs-Bedingung [2] und ein Variationsprinzip [37]. Wir beschränken uns in dieser Arbeit auf das Variationsprinzip, dessen Grundlage folgender Satz ist.

Satz 9.10 [37]:

Sei $\Theta \in \mathcal{B}$. Dann gilt:

$$p(\Theta) = \sup_{\omega \in E} (s(\omega) - \omega(A_\Theta)) \quad . \quad (9.94)$$

Da $(s(\omega) - \omega(A_\Theta))$ auf der Menge E der translationsinvarianten Zustände in der schwachen *-Topologie halbstetig von oben ist, und da E in dieser Topologie kompakt ist, wird das Supremum auf E angenommen. Ferner ist $(s(\omega) - \omega(A_\Theta))$ auf E affin, womit die Menge aller Punkte von E , in denen das Supremum angenommen wird, konvex ist und mindestens einen Extrempunkt von E , d.h. einen ergodischen Zustand, enthält.

Setzen wir für $\Phi \in \mathcal{B}_{\text{vac}}$

$$\begin{aligned} \Theta(\{x\}) &= -\beta\mu N(\{x\}) + \beta\Phi(\{x\}) \quad \text{für } x \in \mathbb{Z}^V \text{ und} \\ \Theta(\Lambda) &= \beta\Phi(\Lambda) \quad \text{für } \Lambda \subset \subset \mathbb{Z}^V \text{ mit } n(\Lambda) \neq 1, \end{aligned} \quad (9.95)$$

so geht die Gleichung (9.94) über in

$$\beta p(\Phi, \beta, \mu) = \sup_{\omega \in E} (s(\omega) - \beta\omega(A_\Phi) + \beta\mu\omega(N(\{0\}))) \quad . \quad (9.96)$$

Man kann nun zeigen, daß gerade für den thermodynamischen Limes der lokalen großkanonischen Ensembles das Supremum in (9.96) angenommen wird [37]. Allgemein nennt man jeden Zustand, für den das

Supremum angenommen wird, einen (translationsinvarianten) Gleichgewichtszustand.

Definition 9.11:

Sei $\Theta \in \mathbb{B}$. Sei $\omega \in E$ derart, daß

$$p(\Theta) = s(\omega) - \omega(A_\Theta) \quad (9.97)$$

ist. Dann heißt ω ein translationsinvarianter Gleichgewichtszustand bezüglich Θ .

Ein translationsinvarianter Gleichgewichtszustand bezüglich des in (9.95) definierten Potentials Θ (bei festgehaltenem $\Phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ also bezüglich der inversen Temperatur β und des chemischen Potentials μ) ist dadurch ausgezeichnet, daß er die Gleichung

$$\beta p(\Phi, \beta, \mu) = s(\omega) - \beta \omega(A_\Phi) + \beta \mu \omega N(\{0\}) \quad (9.98)$$

erfüllt. Diese Gleichung ist das statistische Analogon der thermodynamischen Relation

$$p = T s + \mu \rho - u, \quad (9.99)$$

wobei p der Druck, T die Temperatur, μ das chemische Potential, s die spezifische Entropie, u die spezifische innere Energie und ρ die Teilchendichte ist.

Satz 9.12:

Sei $\phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$. Seien $\beta, \mu \in \mathbb{R}$. Sei $\omega \in \mathcal{E}$ ein translationsinvarianter Gleichgewichtszustand bezüglich des in (9.95) definierten Potentials θ . Dann gilt:

$$s(\omega) = \hat{s}_m(\omega(N(\{0\})), \phi, \omega(A_\phi)) \quad . \quad (9.100)$$

Beweis: Sei $\omega(N(\{0\})) = \rho_0$ und $\omega(A_\phi) = x_0$. Dann ist

$$\begin{aligned} p(\theta) &= s(\omega) - \omega(A_\theta) \\ &= s(\omega) - \beta \omega(A_\phi) + \beta \mu \omega(N(\{0\})) \\ &= s(\omega) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0 \quad . \end{aligned} \quad (9.101)$$

Nach Korollar 9.9 ist

$$s(\omega) \cong \hat{s}_m(\rho_0, \phi, x_0) \quad . \quad (9.102)$$

Mit Satz 6.10 ist

$$\begin{aligned} p(\theta) &= \beta p(\phi, \beta, \mu) \\ &= \sup_{(\rho, x) \in \mathbb{R}^2} (\hat{s}_m(\rho, \phi, x) - \beta x + \beta \mu \rho) \quad , \end{aligned} \quad (9.103)$$

womit gilt:

$$p(\theta) = \hat{s}_m(\rho_0, \phi, x_0) - \beta x_0 + \beta \mu \rho_0 \quad . \quad (9.104)$$

Daraus folgt:

$$s(\omega) = \hat{s}_m(\rho_o, \phi, x_o) \quad . \quad (9.105)$$

Q.E.D.

Verbinden wir diesen Satz mit Korollar 9.9, so besagt er, daß ein translationsinvarianter Gleichgewichtszustand ω_g unter allen Zuständen $\omega \in E$ mit $\omega(N(\{O\})) = \omega_g(N(\{O\}))$ und $\omega(A_\phi) = \omega_g(A_\phi)$ (unter anderem) dadurch ausgezeichnet ist, daß er maximale Entropie besitzt.

Diese Tatsache führt uns dazu, translationsinvariante Gleichgewichtszustände (bei festem Potential $\phi \in \mathbb{B}_{vac}$) zu den Mittelwerten $\langle N(\{O\}) \rangle = \rho_o$ und $\langle A_\phi \rangle = x_o$ zu definieren. Die Definition 9.11 bezüglich eines Potentials liefert uns über das in (9.95) definierte Potential bei festgehaltenem $\phi \in \mathbb{B}_{vac}$ eine Abhängigkeit in den Parametern β und μ .

Definition 9.13:

Sei $\phi \in \mathbb{B}_{vac}$ und seien $\rho_o, x_o \in \mathbb{R}$. Dann heißt ein Zustand $\omega \in E$ ein translationsinvarianter Gleichgewichtszustand zu den Mittelwerten $\langle N(\{O\}) \rangle = \rho_o$ und $\langle A_\phi \rangle = x_o$, wenn gilt:

$$\omega(N(\{O\})) = \rho_o \quad , \quad \omega(A_\phi) = x_o \quad , \quad (9.106)$$

$$s(\omega) = \hat{s}_m(\rho_o, \phi, x_o) \quad . \quad (9.107)$$

Mit anderen Worten, ein translationsinvarianter Gleichgewichtszustand zu den Mittelwerten ρ_o und x_o ist unter allen Zuständen $\omega \in E$ mit $\omega(N(\{O\})) = \rho_o$ und $\omega(A_\phi) = x_o$ dadurch ausgezeichnet, daß er maximale Entropie besitzt. Dieses Auswahl-

prinzip dehnt das bisher nur für endliche Systeme aufgestellte Jaynessche Prinzip der maximalen Entropie [3,21,34] aus auf unendlich große Quantengittersysteme.

Zum Abschluß fassen wir einige Eigenschaften der translationsinvarianten Gleichgewichtszustände zu Mittelwerten in einem Satz zusammen. Der Beweis ergibt sich unmittelbar aus Satz 9.8 und Definition 9.13 .

Satz 9.14:

Sei $\phi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$. Dann gilt:

- a) Zu den Mittelwerten $\langle N(\{0\}) \rangle = \rho_0$ und $\langle A_\phi \rangle = x_0$ existiert dann und nur dann ein translationsinvarianter Gleichgewichtszustand, wenn $\hat{s}_m(\rho_0, \phi, x_0) > -\infty$ ist.
- b) Die Menge aller translationsinvarianten Gleichgewichtszustände zu festen Mittelwerten $\langle N(\{0\}) \rangle = \rho_0$ und $\langle A_\phi \rangle = x_0$ ist konvex und abgeschlossen in der schwachen $*$ -Topologie.
- c) Sei $\psi \in \mathbb{B}_{\text{vac}}$ mit $\chi^\phi = \chi^\psi$. Für ein $a \in \mathbb{N}^V$ seien $P(n(a), \Lambda(a))$, $P(n(a), \Lambda(a))U_\phi(\Lambda(a))$ und $P(n(a), \Lambda(a))U_\psi(\Lambda(a))$ auf $\mathbb{H}(\Lambda(a))$ linear unabhängige Operatoren. Für alle $\Lambda \subset \mathbb{Z}^V$ sei $[U_\phi(\Lambda), U_\psi(\Lambda)] = 0$. Dann existiert ein translationsinvarianter Gleichgewichtszustand $\omega \in E$ zu den Mittelwerten $\langle N(\{0\}) \rangle = \rho_0$ und $\langle A_\phi \rangle = x_0$ mit

$$\omega(A_\psi) = y_0 \quad (9.108)$$

dann und nur dann, wenn

$$\hat{s}_m(\rho_0, \phi, \psi, x_0, y_0) = \sup_{y \in \mathbb{R}} \hat{s}_m(\rho_0, \phi, \psi, x_0, y) > -\infty \quad (9.109)$$

ist.

ANHANG: KONVEXE FUNKTIONEN

Definition A.1:

Sei G eine konvexe Teilmenge eines Vektorraums über dem reellen Körper $\mathbb{R}$. Dann heißt eine Abbildung

$$f : G \longrightarrow \mathbb{R} \quad (A.1)$$

konvex, wenn für alle $x, y \in G$ und alle $\alpha \in [0, 1]$ die Relation

$$f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha) f(y) \quad (A.2)$$

gilt. Eine Abbildung p heißt konkav, wenn $-p$ konvex ist.

Lemma A.2 [10]:

Sei G eine konvexe Teilmenge eines euklidischen Raumes und sei

$$f : G \longrightarrow \mathbb{R} \quad (A.3)$$

eine auf G konvexe Funktion. Dann ist f auf $\text{int } G$ stetig.

Lemma A.3 [49]:

Sei f eine stetige reellwertige Funktion auf einer konvexen offenen Teilmenge G eines topologischen Vektorraums. Sei

$$f\left(\frac{1}{2}x + \frac{1}{2}y\right) \leq \frac{1}{2} f(x) + \frac{1}{2} f(y) \quad (A.4)$$

für alle $x, y \in G$. Dann ist f auf G konvex.

Lemma A.4 [49]:

Sei f eine reellwertige Funktion auf einer konvexen offenen Teilmenge G eines euklidischen Raums. Sei

$$f\left(\frac{1}{2}x + \frac{1}{2}y\right) \leq \frac{1}{2} f(x) + \frac{1}{2} f(y) \quad (A.5)$$

für alle $x, y \in G$, und sei f auf G lokalbeschränkt. Dann ist f auf G stetig und damit konvex.

Lemma A.5 [27]:

Sei $f(x, y)$ eine in (x, y) konvexe Funktion. Dann ist

$$\inf_y f(x, y) \quad (A.6)$$

konvex in x .

Definition A.6:

Sei f eine reellwertige Funktion auf einer offenen Teilmenge G eines topologischen Vektorraums L . Wenn der Limes

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{f(x + \lambda y) - f(x)}{\lambda}, \quad \lambda > 0 \quad (A.7)$$

für alle $x \in G, y \in L$ mit $x + \lambda y \in G$ existiert, so sagt man, daß f ein einseitiges Gateaux-Differential besitzt.

Lemma A.7 [49]:

Eine auf einer konvexen offenen Teilmenge eines topologischen Vektorraums definierte konvexe reellwertige Funktion besitzt ein einseitiges Gateaux-Differential.

Lemma A.8 [49]:

Sei f eine auf einer konvexen offenen Teilmenge G des euklidischen Raums $\mathbb{R}$ definierte konvexe Funktion. Dann ist die Menge der Punkte von G , in denen f nicht differenzierbar ist, abzählbar.

Bemerkung A.9 [10]:

Sei G eine konvexe Teilmenge eines euklidischen Raums. Sei f eine auf G definierte konvexe reellwertige Funktion. Mit Lemma A.2 ist f auf $\text{int } G$ stetig. Sei $x_0 \in \partial G$, dem Rand von G . Ist der euklidische Raum eindimensional, so existiert

$$\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) \quad (\text{A.8})$$

im erweiterten Sinn. Ist die Dimension größer als 1, so können wir nicht mehr schließen, daß der Limes (A.8) existiert. Ändern wir nun, wenn nötig, G und f , indem wir zu G alle Randpunkte $x_0 \in \partial G$ addieren, für die

$$\liminf_{x \rightarrow x_0} f(x) \quad (\text{A.9})$$

endlich ist, und definieren die Funktion f in diesen Punkten und allen Randpunkten x_0 , die zu G gehören, durch

$$f(x_0) = \liminf_{x \rightarrow x_0} f(x) \quad , \quad (\text{A.10})$$

dann sind das neue $\hat{G}$ und die neue Funktion $\hat{f}$ konvex und $\hat{f}$ ist auf $\hat{G}$ halbstetig von unten.

Lemma A.10 [10]:

Sei G eine konvexe Teilmenge des euklidischen Raums $\mathbb{R}^n$. Sei $f(x)$ eine auf G definierte konvexe reellwertige Funktion, die außerdem auf G halbstetig von unten ist. Sei für alle Randpunkte $x_0 \in \partial G$, die nicht zu G gehören,

$$\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = \infty \quad . \quad (\text{A.11})$$

Bezeichne $(\cdot, \cdot)$ das Skalarprodukt in $\mathbb{R}^n$. Dann gilt:

- a) Es existieren genau eine Menge $\Gamma \subset \mathbb{R}^n$ und genau eine reellwertige Funktion $\varphi(\xi)$ auf Γ mit genau den gleichen Eigenschaften wie G und f derart, daß

$$(x, \xi) \leq f(x) + \varphi(\xi) \quad (\text{A.12})$$

ist, wobei zu jedem $x \in \text{int } G$ mindestens ein $\xi \in \Gamma$ derart existiert, daß in (A.12) das Gleichheitszeichen gilt.

- b) Γ ist die Menge aller $\xi \in \mathbb{R}^n$, für die

$$(x, \xi) = f(x) \quad (\text{A.13})$$

für alle $x \in G$ gleichmäßig von oben beschränkt ist und

$$\varphi(\xi) = \sup_{x \in G} ((x, \xi) - f(x)) . \quad (\text{A.14})$$

Umgekehrt gilt

$$f(x) = \sup_{\xi \in \Gamma} ((\xi, x) - \varphi(\xi)) \quad (\text{A.15})$$

und G ist die Menge aller $x \in \mathbb{R}^n$, für die

$$\sup_{\xi \in \Gamma} ((\xi, x) - \varphi(\xi))$$
(A.16)

endlich ist.

Bemerkung A.11 [10]:

Seien G und f , Γ und φ wie in Lemma A.10. Sei $f(x)$ streng konvex, d.h. jede Stützhyperebene enthalte nur einen Punkt des Graphen von $f(x)$. Sei $\varphi(\xi)$ ebenfalls streng konvex, d.h. durch jeden Punkt des Graphen von $f(x)$ gehe höchstens eine Stützhyperebene. Dann hat $f(x)$ stetige Ableitungen

$$f_i(x) = \frac{\partial f(x)}{\partial x_i} \quad (\text{A.17})$$

und es gilt:

$$\xi_i = f_i(x) \quad . \quad (A.18)$$

Die Relationen (A.17) und (A.18) definieren eine stetige, eindeutige Abbildung von $\text{int } G$ auf $\text{int } \Gamma$. Lösen wir sie bezüglich x , so erhalten wir

$$x_i = \varphi_i(\xi) \quad (A.19)$$

mit

$$\varphi_i(\xi) = \frac{\partial \varphi(\xi)}{\partial \xi_i} \quad . \quad (A.20)$$

Damit erhalten wir einen auf $\text{int } \Gamma$ gültigen Ausdruck für $\varphi(\xi)$, nämlich

$$\varphi(\xi) = \sum_{i=1}^n (\xi_i \varphi_i(\xi) - f(\varphi_i(\xi))) \quad . \quad (A.21)$$

Dies ist gerade eine Legendre-Transformation, so daß wir (A.14) als verallgemeinerte Legendre-Transformation auffassen können.

Bemerkung A.12 [32]:

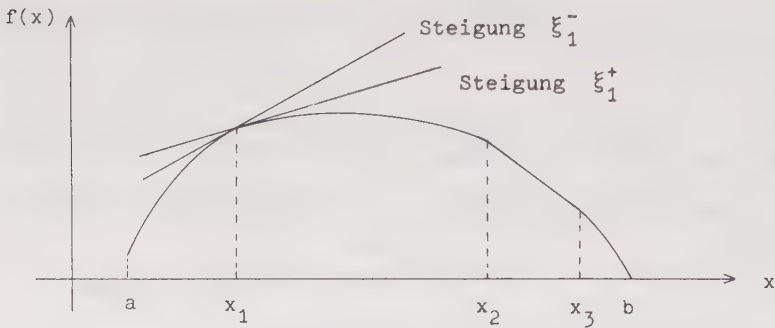
Wir betrachten nun einen Spezialfall von Lemma A.10 im euklidischen Raum $\mathbb{R}$. Sei $f(x)$ eine auf $G = [a, b]$ konkave reellwertige Funktion. Dann ist $f(x)$ auf (a, b) stetig (Lemma A.2), besitzt auf G ein einseitiges Gateaux-Differential (Lemma A.7) und die Menge aller Punkte, in denen $f(x)$ nicht differenzierbar ist, ist abzählbar (Lemma A.8). Mit der Konkavität gelten die (A.14) und (A.15) entsprechenden Formeln

$$\varphi(\xi) = \inf_{x \in G} (x \xi - f(x)) \quad , \quad (A.22)$$

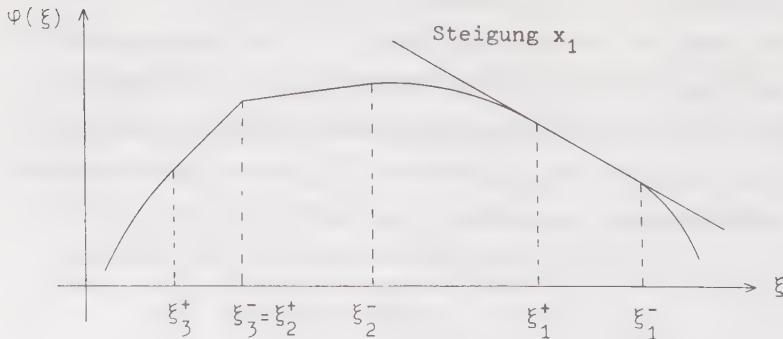
$$f(x) = \inf_{\xi \in \Gamma} (x\xi - \varphi(\xi)) \quad . \quad (A.23)$$

Nach Lemma A.10 existiert zu jedem $x \in (a, b)$ ein $\xi \in \Gamma$ derart, daß in (A.22) das Infimum angenommen wird.

Wir sind nun daran interessiert, wie wir diese Relation $R(x, \xi)$ geometrisch interpretieren können. Der Graph von $f(x)$ habe die Form,



d.h. $f(x)$ habe außer in x_1, x_2 und x_3 stetige Ableitungen, der Graph von $f(x)$ sei in dem Intervall $[x_2, x_3]$ eine Strecke und $f(x)$ sei auf $[a, x_2]$ streng konvex. Seien ξ_i^- bzw. ξ_i^+ die links- bzw. rechtsseitigen Ableitungen in den Punkten $x_i (i=1, 2, 3)$. Damit hat der Graph von $\varphi(\xi)$ folgende Form:



Betrachten wir zunächst, wie die Relation $R(x, \xi)$ für Punkte aus dem Intervall (a, x_1) aussieht. Mit der Bemerkung A.11 ist

$$\xi = f'(x) \quad . \quad (A.24)$$

Da in dem Intervall (a, x_1) $f'(x)$ streng monoton fallend ist, ist die Relation $R(x, \xi)$ eineindeutig. Das Infimum aller ξ ist ξ_1^- . In dem Intervall (x_1, x_2) gilt ebenfalls (A.24) und $f'(x)$ ist ebenfalls streng monoton fallend. Damit ist auf (x_1, x_2) die Relation $R(x, \xi)$ eineindeutig und jedem Punkt $x \in (x_1, x_2)$ entspricht genau ein Punkt $\xi \in (\xi_1^+, \xi_2^-)$.

Für den Punkt x_1 ist $R(x_1, \xi)$ nicht mehr eindeutig. Dem Punkt x_1 wird das Intervall $[\xi_1^-, \xi_1^+]$ zugeordnet. Damit ist $\varphi(\xi)$ auf $[\xi_1^-, \xi_1^+]$ linear, d.h. es gilt:

$$\varphi(\xi) = x_1 \xi - f(x_1) \quad . \quad (A.25)$$

Allen Punkten aus dem Intervall (x_2, x_3) wird der gleiche Wert $\xi_2^+ = \xi_3^-$ zugeordnet.

Jedem $x \in (a, b)$ wird also die Menge aller Steigungen der Stützgeraden durch den Punkt $(x, f(x))$ zugeordnet. Damit gehen Intervalle von G mit streng monotonen Ableitungen von $f(x)$ über in Intervalle von Γ mit streng monotonen Ableitungen von $\varphi(\xi)$. Punkte im Graphen von $f(x)$, in denen die Ableitungen nicht existieren, gehen über in Strecken im Graphen von $\varphi(\xi)$. Strecken im Graphen von $f(x)$ gehen über in Punkte des Graphen von $\varphi(\xi)$, in denen die Ableitung nicht existiert.

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] Araki, H., Ion, P.D.F. : Commun.math.Phys. 35, 1 (1974)
- [2] Araki, H. : Commun.math.Phys. 38, 1 (1974)
- [3] Bayer, W., Ochs, W. : Z.Naturforsch. 28a, 693 (1973)
- [4] Callen, H. : "Thermodynamics", John Wiley and Sons,
New York (1960)
- [5] Dixmier, J. : "Les algèbres d'opérateurs dans l'espace
hilbertien (Algèbres de von Neumann)",
Gauthier-Villars, Paris (1957)
- [6] Dixmier, J. : "Les C^* -algèbres et leurs représentations",
Gauthier-Villars, Paris (1964)
- [7] Dubin, D.A. : "Solvable Models in Algebraic Statistical
Mechanics", Clarendon Press, Oxford (1974)
- [8] Emch, G.G. : "Algebraic Methods in Statistical Mechanics and
Quantum Field Theory", John Wiley and Sons,
New York (1972)
- [9] Fannes, M. : Commun.math.Phys. 31, 291 (1973)
- [10] Fenchel, W. : Can.J.Math. 1, 73 (1949)
- [11] Fisher, M.E. : Arch.Ration.Mech.Anal. 17, 377 (1964)
- [12] Galgani, L., Luciano, M., Scotti, A. : J.Math.Phys. 12, 933
(1971)
- [13] Gallavotti, G., Miracle-Sole, S. : Commun.math.Phys. 5, 317
(1967)
- [14] Gibbs, J.W. : "Elementary Principles in Statistical Mechanics"
in Collected Works, Vol II, New Haven (1948)
- [15] Griffiths, R.B. : J.Math.Phys. 5, 1215 (1964)
- [16] Griffiths, R.B. : J.Math.Phys. 6, 1447 (1965)
- [17] Griffiths, R.B., Ruelle, D. : Commun.math.Phys. 23, 169 (1971)

- [18] Griffiths, R.B. : In "Phase Transitions and Critical Phenomena" (C.Domb and M.S.Green, eds), Vol I, Academic Press, London (1972)
- [19] Haag, R., Hugenholtz, N.M., Winnink, M. : Commun.math.Phys. 5, 215 (1967)
- [20] Huang, K. : "Statistical Mechanics", John Wiley and Sons, New York (1963)
- [21] Jaynes, E.T. : Phys.Rev. 106, 620 (1957)
- [22] Jaynes, E.T. : Phys.Rev. 108, 171 (1957)
- [23] Lanford, O.E., Ruelle, D. : J.Math.Phys. 8, 1460 (1967)
- [24] Lanford, O.E., Robinson, D.W. : J.Math.Phys. 9, 1120 (1968)
- [25] Lanford, O.E., Robinson, D.W. : Commun.math.Phys. 9, 327 (1968)
- [26] Lanford, O.E. : In "Cargèse Lectures in Physics" (D.Kastler, ed.), Vol 4, Gordon and Breach, New York (1970)
- [27] Lanford, O.E. : In "Statistical Mechanics and Mathematical Problems" Batelle Seattle 1971 Rencontres (A.Lenard, ed.) , Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York (1973)
- [28] Lima, R. : Ann.Inst.Henri Poincaré 15, 61 (1971)
- [29] Lima, R. : Commun.math.Phys. 24, 180 (1972)
- [30] Mandelbrojt, S. : C.R.Acad.Sci.(Paris) 209, 977 (1939)
- [31] Matsubara, T., Matsuda, H. : Progr.Theor.Phys. 16, 416 (1956)
- [32] Minlos, R.A., Povzner, A.Y. : Trans.Moscow Math.Soc. 17, 269 (1967)
- [33] Münster, A. : "Statistical Thermodynamics", Vol I, Academic Press, New York (1969)
- [34] Ochs, W., Bayer, W. : Z.Naturforsch. 28a, 1571 (1973)
- [35] Phelps, R.R. : "Lectures on Choquet's Theorem", D.Van Nostrand, Princeton (1966)

- [36] Reed,M., Simon,B. : "Methods of Modern Mathematical Physics",
Vol I, Academic Press, New York (1972)
- [37] Robinson,D.W. : Commun.math.Phys. 6, 151 (1967)
- [38] Robinson,D.W. : Commun.math.Phys. 7, 337 (1968)
- [39] Roos,H. : Commun.math.Phys. 36, 263 (1974)
- [40] Ruelle,D. : Helv.Phys.Acta 36, 183 (1963)
- [41] Ruelle,D. : Helv.Phys.Acta 36, 789 (1963)
- [42] Ruelle,D. : J.Math.Phys. 6, 201 (1965)
- [43] Ruelle,D. : Commun.math.Phys. 3, 133 (1966)
- [44] Ruelle,D. : "Statistical Mechanics", Benjamin, New York
(1968)
- [45] Ruelle,D. : J.Funct.Anal. 6, 116 (1970)
- [46] Sakai,S. : " C^* -Algebras and W^* -Algebras", Springer-Verlag,
Berlin-Heidelberg-New York, (1971)
- [47] Truong,L. : Thesis, California State University, San
Francisco
- [48] Truong,L. : Commun.math.Phys. 39, 207 (1974)
- [49] Valentine,F.A. : "Convex Sets", McGraw-Hill, New York (1964)
- [50] Van der Linden,J. : Physica 32, 642 (1966)
- [51] Van der Linden,J, Mazur,P. : Physica 36, 491 (1967)
- [52] Van Hove,L. : Physica 15, 951 (1949)
- [53] Wichmann,E.H. : J.Math.Phys. 4, 884 (1963)

DANKSAGUNG

Ich danke Herrn Prof. Dr. G. Süßmann für die freundliche Unterstützung der vorliegenden Arbeit.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Priv.-Doz. Dr. W. Ochs für die wertvollen Anregungen und klärenden Unterhaltungen bei der Betreuung dieser Arbeit.

Mein Dank gilt ebenfalls Herrn Dr. H. Spohn für die hilfreichen Diskussionen.

Diese Arbeit wurde in dankenswerter Weise aus Mitteln des Graduiertenförderungsgesetzes und der Bayern-Pfalz-Stiftung unterstützt.

LEBENS LAUF

Ich wurde am 13. Januar 1948 als zweites Kind des Diplom-Ingenieurs Friedrich Bayer und dessen Ehefrau Margarete Bayer, geb. Schanz, in Kaiserslautern geboren. Von 1954 bis 1964 besuchte ich in Lauterecken die Volksschule und das Progymnasium. Im Oktober 1966 legte ich am Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Gymnasium in Kaiserslautern das Abitur ab. Im Wintersemester 1966/67 begann ich an der Universität Karlsruhe das Studium der Physik und bestand an dieser Universität Anfang Wintersemester 1968/69 die Diplomvorprüfung. Mit dem Sommersemester 1969 setzte ich das Studium an der Technischen Universität München fort und legte dort im Sommersemester 1970 die Diplomhauptprüfung ab. Anschließend begann ich unter Anleitung von Herrn Prof. Dr. G. Süßmann meine Diplomarbeit mit dem Titel "Über die allgemeine Form des Zustandsoperators in der Quantenstatistik", die ich im November 1971 beendete. Danach studierte ich ein Jahr Mathematik (Informatik). Im Frühjahr 1973 begann ich mit meiner Dissertation. Von April bis Juni 1975 war ich am Institut des Hautes Etudes Scientifiques in Bures-sur-Yvette.

